

ÉCOLE DE TECHNOLOGIE SUPÉRIEURE
UNIVERSITÉ DU QUÉBEC

MÉMOIRE PRÉSENTÉ À
L'ÉCOLE DE TECHNOLOGIE SUPÉRIEURE

COMME EXIGENCE PARTIELLE
À L'OBTENTION DE LA
MAÎTRISE EN GÉNIE MÉCANIQUE
M. Sc. A.

PAR
Jérémie BISSON

MODÉLISATION 0D/1D DES ÉMISSIONS DE PARTICULES DE SUIE
DANS LES TURBINES À GAZ AÉRONAUTIQUES

MONTREAL, LE 13 JUIN 2014



Jérémie Bisson, 2014



Cette licence [Creative Commons](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/) signifie qu'il est permis de diffuser, d'imprimer ou de sauvegarder sur un autre support une partie ou la totalité de cette œuvre à condition de mentionner l'auteur, que ces utilisations soient faites à des fins non commerciales et que le contenu de l'œuvre n'ait pas été modifié.

PRÉSENTATION DU JURY

CE MÉMOIRE A ÉTÉ ÉVALUÉ

PAR UN JURY COMPOSÉ DE :

M. François Garnier, directeur de mémoire
Département de génie mécanique à l'École de technologie supérieure

M. Patrice Seers, codirecteur de mémoire
Département de génie mécanique à l'École de technologie supérieure

M. Stéphane Hallé, président du jury
Département de génie mécanique à l'École de technologie supérieure

M. Julien Weiss, membre du jury
Département de génie mécanique à l'École de technologie supérieure

M. Gilles Bourque, examinateur externe
Rolls-Royce Canada

IL A FAIT L'OBJET D'UNE SOUTENANCE DEVANT JURY ET PUBLIC

LE 9 JUIN 2014

À L'ÉCOLE DE TECHNOLOGIE SUPÉRIEURE

AVANT-PROPOS

Avec 2.8 milliards de passagers en 2011 (IATA, 2012) et une prévision de 3.6 milliards de passagers d'ici 2016, le transport aérien connaît une croissance fulgurante depuis ces deux dernières décennies qui ne s'étend plus désormais aux seuls pays industrialisés de l'hémisphère nord. Cette croissance stabilisée autour de 5 % par an (IPCC, 2007a) n'est pas sans conséquence pour l'atmosphère terrestre et plus généralement l'environnement. Bien que la part du transport aérien dans les émissions de gaz à effet de serre d'origine anthropique soit évaluée à hauteur de 3.5 %¹ en 2005 (avec un intervalle de confiance de 90 %, Lee et al., 2009), l'impact sur l'atmosphère qui en résulte est loin d'être négligeable.

En effet, les avions subsoniques actuels volent la majorité du temps dans la haute atmosphère (entre 9 km et 13 km d'altitude) afin de minimiser la consommation de carburant. Or à ces altitudes, les émissions émanant des réacteurs (dioxyde de carbone, d'azote, de soufre, vapeur d'eau, suies et aérosols...) ont un potentiel de modification de la chimie atmosphérique et de ses propriétés physiques qui est hautement amplifié en comparaison à des émissions similaires aux sols. Ceci tient à la faible densité des espèces chimiques à ces altitudes qui favorisent à la fois le temps de résidence et l'accumulation des polluants émis (Vancassel, 2003). De plus, le trafic aérien est très localisé à l'échelle planétaire. Il est canalisé soit dans un périmètre restreint autour des aéroports, soit le long de couloirs aériens qui relient les principaux aéroports mondiaux. Il en résulte que les concentrations en émissions dans ces zones atteignent des seuils qui peuvent à la fois perturber régionalement le climat (effet de serre, changement de nébulosité dû aux particules relâchées dans l'air) et générer des problématiques de santé, notamment aux abords des zones aéroportuaires, avec la production de particules fines qui dégradent la qualité de l'air.

¹ Il est à noter que ce pourcentage est amené à croître à une valeur de 4 à 4.7 % d'ici 2050 (en ne tenant pas compte des effets indirects dus à la formation de cirrus et de changement de nébulosité, Lee et al. (2009)).

L'intérêt porté à l'impact spécifique du transport aérien sur les changements climatiques est assez récent et remonte au début des années 1960 avec les prémices du vol supersonique et les problèmes d'appauvrissement de la couche d'ozone stratosphérique qu'il peut générer (Lee et al., 2010). Plus récemment, le Groupe d'experts Intergouvernemental sur l'Évolution du Climat (GIEC) a tenté de dresser un état des lieux assez exhaustif des répercussions présentes et à venir du transport aérien sur les changements climatiques, au travers d'un rapport spécial intitulé « L'aviation et l'atmosphère planétaire » (IPCC, 1999). Il ressort en conclusion de ce rapport qu'une grande part des émissions d'aéronefs ainsi que leurs influences sur l'atmosphère sont encore méconnues « à cause de nombreuses incertitudes scientifiques » qui ont pour principale conséquence de limiter « la capacité à faire des projections des effets de l'aviation sur le climat et l'ozone » (IPCC, 1999).

Cette prise en compte progressive du potentiel de perturbation du climat et de la qualité de l'air par l'aviation a conduit des organisations internationales comme l'Organisation de l'Aviation Civile Internationale (OACI), ou des consortiums industriels tels que le Conseil français pour la Recherche Aéronautique Civile (CORAC), à mettre en place des réglementations et des engagements à long terme pour limiter les émissions de gaz à effets de serre et de particules. Toutefois, ces objectifs ne peuvent être atteints en pratique que s'ils sont réellement intégrés au processus de conception des moteurs.

Devant ces enjeux auxquels la recherche aéronautique et environnementale doit faire face, le domaine de la simulation numérique apparaît comme un outil puissant, rapide et économique pour répondre à ces attentes. Son usage a permis de développer des concepts théoriques sur le cycle de vie des émissions polluantes, en permettant d'aller du niveau moléculaire de la réaction chimique de combustion à celui de la propagation planétaire des émissions dans l'atmosphère. De plus, la simulation numérique permet l'étude et l'intégration de diverses solutions technologiques dans le but de réduire les émissions dès la conception du moteur, et ce, avec une flexibilité et un coût d'investissement incomparable qui expliquent entre autres l'engouement croissant des industriels pour cet outil.

REMERCIEMENTS

Mes premiers remerciements s'adressent à mon directeur de recherche François Garnier et mon codirecteur Patrice Seers. Je leur suis très reconnaissant de m'avoir donné l'opportunité d'effectuer un projet de recherche dans des domaines où je souhaitais approfondir mes connaissances. À cela s'ajoute leur disponibilité, leur confiance et surtout la liberté qu'ils m'ont accordées dans la gestion de mon projet de recherche. Ces éléments ont pour beaucoup contribué au bon avancement et à la réalisation de ce mémoire et je leur en sais gré.

Je désire également remercier Dr. Chen-Pang Chou de Reaction Design pour son précieux soutien technique dans l'utilisation du logiciel CHEMKIN ainsi que Dr. Meghdad Saffaripour de l'université de Toronto, pour le partage de ses travaux de recherche notamment sur le mécanisme de combustion du kérosène et de formation des précurseurs de suies. Cette contribution a été un tournant majeur dans le développement du modèle proposé dans ce mémoire et m'a permis de réaliser la portée que peut avoir toute coopération scientifique.

Mes remerciements les plus chaleureux sont destinés à mes parents, ma compagne et les membres de ma famille française et québécoise. Ils ont chacun contribué à leur façon à mon bien-être personnel durant cette maîtrise et n'ont jamais cessé de m'encourager dans tout ce que j'ai voulu entreprendre. Ce mémoire leur est dédié.

Je finirai en remerciant aussi l'École de Technologie Supérieure pour son soutien financier au travers des bourses qui m'ont été accordées.

MODÉLISATION 0D/1D DES ÉMISSIONS DE PARTICULES DE SUIE DANS LES TURBINES À GAZ AÉRONAUTIQUES

Jérémie BISSON

RÉSUMÉ

Face à une réglementation de plus en plus exigeante sur les émissions de particules d'aéronef à laquelle s'ajoutent des incertitudes entourant leur formation et leurs effets sur l'atmosphère, une meilleure compréhension de leurs mécanismes physico-chimiques et de leurs interactions avec les composantes des moteurs s'impose.

Ce mémoire porte sur le développement d'un modèle 0D/1D de combustion avec production de suies dans une turbine à gaz aéronautique. Un des objectifs majeurs de cette étude a été d'évaluer la qualité des prédictions en matière d'émissions de suies obtenues avec ce modèle pour différentes configurations de vol. Ce dernier devrait permettre à terme la réalisation d'études paramétriques sur des moteurs existants ou futurs avec un temps de calcul minimal.

Le modèle représente plusieurs zones de la chambre de combustion et des modules turbines et tuyère par un réseau de réacteurs chimiques (CRN) couplé à une cinétique détaillée de combustion du kérosène et à un modèle dynamique de formation des particules de suie utilisant la méthode des moments. Ce CRN a été appliqué au moteur CFM56-2C1 sur les configurations de vol du cycle LTO (Landing-Take-Off) étudiées dans la campagne expérimentale sur les émissions de particules aéronautiques APEX-1. Le modèle a été validé principalement sur les données thermodynamiques du moteur et les concentrations de polluants (H_2O , CO_x , NO_x , SO_x) mesurées dans cette même étude. Cette première étape de validation opérée, le modèle a par la suite été utilisé pour le calcul du diamètre moyen ainsi que les indices d'émissions massiques et en nombre de la population de particules.

Globalement, le modèle est représentatif des conditions thermodynamiques au sein du moteur et parvient à prédire les émissions de polluants majeurs, particulièrement à forte puissance moteur. Concernant les émissions de particules de suie, la capacité du modèle à prédire simultanément les indices d'émissions et le diamètre moyen n'a pu être validée que partiellement. En effet, les indices d'émissions massiques restent supérieurs aux résultats expérimentaux notamment à forte puissance. Ces écarts sur cet indice d'émissions peuvent être la conséquence d'incertitudes sur les paramètres thermodynamiques du CRN et sur la distribution de l'air dans la chambre de combustion. L'analyse de l'évolution de l'indice d'émissions en nombre de particules le long du CRN a également souligné la nécessité de revoir le modèle de nucléation employé et d'envisager à l'avenir l'implantation d'un mécanisme d'agrégation des particules.

Mots-clés : turbine à gaz, modèle d'émissions, suies, réacteur chimique, combustion.

0D/1D MODELING OF SOOT PARTICLE EMISSIONS IN AIRCRAFT GAS TURBINE ENGINES

Jérémie BISSON

ABSTRACT

Because of more stringent regulations of aircraft particle emissions as well as strong uncertainties about their formation and their effects on the atmosphere, a better understanding of particle microphysical mechanisms and their interactions with the engine components is required.

This thesis focuses on the development of a 0D/1D combustion model with soot production in an aeronautical gas turbine. A major objective of this study is to assess the quality of soot particle emission predictions for different flight configurations. The model should eventually allow performing parametric studies on current or future engines with a minimal computation time.

The model represents the combustor as well as turbines and nozzle with a chemical reactor network (CRN) that is coupled with a detailed combustion chemistry for kerosene (Jet A-1) and a soot particle dynamics model using the method of moments. The CRN was applied to the CFM56-2C1 engine during flight configurations of the LTO cycle (Landing-Take-Off) as in the APEX-1 study on aircraft particle emissions. The model was mainly validated on gas turbine thermodynamic data and pollutant concentrations (H_2O , CO_x , NO_x , SO_x) which were measured in the same study. Once the first validation completed, the model was subsequently used for the computation of mass and number-based emissions indices of the soot particulate population and average diameter.

Overall, the model is representative of the thermodynamic conditions and succeeds in predicting the emissions of major pollutants, particularly at high power. Concerning soot particulate emissions, the model's ability to predict simultaneously the emission indices as well as mean diameter has been partially validated. Indeed, the mass emission indices have remained higher than experimental results particularly at high power. These differences on particulate emission index may be the result of uncertainties on thermodynamic parameters of the CRN and mass air flow distribution in the combustion chamber. The analysis of the number-based emission index profile along the CRN also highlights the need to review the nucleation model that has been used and to consider in the future the implementation of a particle aggregation mechanism.

Keywords: gas turbine, emission model, soot, chemical reactor, combustion.

TABLE DES MATIÈRES

INTRODUCTION	1
CHAPITRE 1 REVUE DE LITTÉRATURE	5
1.1 Composition et formation des émissions polluantes dans une turbine à gaz.	5
1.1.1 Préambule : architecture d'une turbine à gaz aéronautique	5
1.1.2 Composition et formation des émissions polluantes.....	9
1.1.3 Caractérisation des émissions de particules de suie.....	11
1.2 Théories sur la formation des particules de suie et modélisation.	12
1.2.1 Processus global de formation	12
1.2.2 État de l'art sur les mécanismes de formation des suies	14
1.3 Modèles 0D/1D de prédiction des émissions polluantes dans les turbines à gaz	18
1.3.1 Concept de réseau de réacteurs chimiques (CRN).....	18
1.3.2 CRN avec zone primaire mono- ou biréacteurs	20
1.3.3 CRN avec zone primaire multiréacteurs	23
1.3.4 Modèles 0D/1D avec postcombustion	24
1.3.5 Bilan	26
1.4 Objectifs du mémoire.....	27
CHAPITRE 2 MODÈLE DE COMBUSTION ET DE POSTCOMBUSTION DANS LES TURBINES À GAZ AÉRONAUTIQUES PAR RÉSEAU DE RÉACTEURS CHIMIQUES	29
2.1 Théorie sur les modèles de réacteurs chimiques PSR et PFR.....	29
2.1.1 Réacteur 0D : le PSR (Perfectly Stirred Reactor).....	29
2.1.2 Réacteur 1D : le PFR (Plug Flow Reactor).....	32
2.2 Conception du CRN pour turbines à gaz aéronautiques	34
2.2.1 CRN pour la chambre de combustion	34
2.2.2 CRN pour les modules postchambre (turbines et tuyère)	39
2.2.3 Hypothèses relatives au paramétrage du CRN.....	40
2.3 Détails sur l'initialisation et l'exécution des calculs dans le CRN	41
CHAPITRE 3 MÉCANISMES DE COMBUSTION DU KÉROSÈNE ET DE FORMATION DES PARTICULES DE SUIE.....	45
3.1 Préambule	45
3.2 Mécanisme de combustion du kérosène et de formation des précurseurs de suie	45
3.3 Modèle de formation des particules de suie.....	47
3.3.1 Cinétique de croissance en surface des particules	48
3.3.2 Modèle de coagulation et méthodes de détermination des propriétés des particules	52
3.3.3 Validation du mécanisme de formation des particules de suie	56

CHAPITRE 4	CALIBRATION ET VALIDATION DU RÉSEAU DE RÉACTEURS CHIMIQUES	59
4.1	Préambule	59
4.2	Configurations expérimentales de référence.....	59
4.2.1	Chambre de combustion	60
4.2.2	Modules turbines et tuyère.....	62
4.3	Calibration du CRN	64
4.3.1	Calibration du nombre de PSRs pour la zone primaire.....	65
4.3.2	Calibration du paramètre de mélange « S »	68
4.4	Validation du CRN	71
4.4.1	Évolutions d'EINO _x et d'EICO en fonction du paramètre « S »	72
4.4.2	Produits de combustion caractéristiques en sortie de moteur	75
4.4.3	Thermodynamique du CRN.....	77
4.5	Conclusion partielle	83
CHAPITRE 5	EXPLOITATION DU RÉSEAU DE RÉACTEURS CHIMIQUES POUR LA PRÉDICTION DES ÉMISSIONS DE PARTICULES DE SUIE	85
5.1	Paramétrage du module « Particle Tracking Feature » de CHEMKIN-PRO	85
5.2	Prédiction des émissions de particules de suie par le CRN	86
5.2.1	Données expérimentales de comparaison	87
5.2.2	Résultats associés aux valeurs calibrées du paramètre de mélange « S »	87
5.3	Analyse d'EIm-num, EIn-num et Dp en fonction de « S ».....	92
5.4	Analyse de sensibilité sur la calibration du paramètre de mélange « S »	95
5.5	Évolution des particules de suie et des espèces précurseurs le long du CRN.....	97
5.5.1	Analyse des propriétés de la population de particules le long du CRN....	97
5.5.2	Analyse des concentrations en espèces précurseurs le long du CRN	99
5.6	Conclusion partielle	103
CONCLUSION	105
RECOMMANDATIONS	109
ANNEXE I	RÉPARTITION DE LA FRACTION DE MÉLANGE DANS LES PSRs DE LA ZONE PRIMAIRE	111
ANNEXE II	PARAMÈTRES INITIAUX À DÉFINIR DANS LE MODÈLE DE CRN POUR TURBINES À GAZ AÉRONAUTIQUES	113
ANNEXE III	EXPRESSIONS DE LA FRÉQUENCE DE COLLISION ENTRE PARTICULES EN FONCTION DU NOMBRE DE KNUDSEN (Kn).....	115
ANNEXE IV	DÉTERMINATION DES PROPRIÉTÉS DE LA POPULATION DE PARTICULES PAR LA MÉTHODE DES MOMENTS	117
ANNEXE V	ÉVALUATION DES PARAMÈTRES THERMODYNAMIQUES DU MOTEUR CFM56-2C1 (ÉTUDE APEX-1).....	119

ANNEXE VI	DIMENSIONS CARACTÉRISTIQUES DE LA CHAMBRE DE COMBUSTION DU MOTEUR F101-PV ET DES MODULES POSTCHAMBRE	121
ANNEXE VII	DISTRIBUTION DE LA FRACTION DE MÉLANGE POUR LES VALEURS DU PARAMÈTRE DE MÉLANGE « S » RETENUES.....	123
BIBLIOGRAPHIE		125

LISTE DES TABLEAUX

	Page
Tableau 3.1	Composition du kérosène de substitution employé dans le mécanisme réactionnel et propriétés caractéristiques associées46
Tableau 3.2	Constante de vitesse de la réaction de nucléation par dimérisation du pyrène (A_4).....48
Tableau 3.3	Constante de vitesse des réactions du mécanisme HACA-Appel de croissance des particules de suie.....50
Tableau 3.4	Constante de vitesse des réactions du mécanisme HACA-Kazakov de croissance des particules de suie.....50
Tableau 3.5	« Sticking coefficients » associés aux réactions du mécanisme de croissance des particules de suie par condensation de PAHs51
Tableau 3.6	Constante de vitesse des réactions d'oxydation des suies par OH et O.....51
Tableau 3.7	Constante de vitesse des réactions d'oxydation des suies par O ₂52
Tableau 4.1	Conditions d'opération en entrée de chambre de combustion pour le moteur CFM56-2C1, pour quatre configurations de l'étude APEX-160
Tableau 4.2	Répartition des débits d'air considérée, issue de la chambre de combustion F101-PV (configuration « Full-Annular»)61
Tableau 4.3	Richesse moyenne dans la zone primaire pour les quatre configurations étudiées62
Tableau 4.4	Conditions d'opération considérées dans les modules turbines.....63
Tableau 4.5	Indice d'émissions du CO et des NO _x pour les configurations de l'étude APEX-1 étudiées.....65
Tableau 4.6	Valeurs du paramètre de mélange S calibrées et indices d'émissions associés70
Tableau 4.7	Fractions molaires de produits combustion caractéristiques en sortie de moteur76
Tableau 4.8	Fractions molaires des composés à base de soufre en sortie de moteur77
Tableau 4.9	Températures calculées par le modèle de CRN en sortie des zones primaire et secondaire81

XVIII

Tableau 4.10	Températures moyennes et maximales rencontrées dans la zone primaire et secondaire d'une chambre de combustion aéronautique81
Tableau 4.11	Températures calculées par le modèle de CRN en sortie de chambre de combustion82
Tableau 4.12	Températures calculées par le modèle de CRN dans le plan de sortie de la tuyère82
Tableau 5.1	Évaluation du nombre de Knudsen Kn dans le CRN au décollage et au ralenti86
Tableau 5.2	Indices d'émissions et diamètre moyen des particules en sortie de moteur calculés par le modèle de CRN88
Tableau 5.3	Indice d'émissions de l'acétylène (EIC_2H_2) calculé par le modèle de CRN en sortie de moteur100

LISTE DES FIGURES

	Page
Figure 1.1	Vue en coupe d'un turboréacteur à double flux (« turbofan »).....6
Figure 1.2	Schéma d'une chambre de combustion de turbine à gaz7
Figure 1.3	Formation des principaux produits de combustion au sein d'une chambre de combustion de turbine à gaz10
Figure 1.4	Formation, interaction et croissance dans le sillage d'un avion des particules émises par les moteurs.....12
Figure 1.5	Étapes majeures dans la formation des suies13
Figure 1.6	Formation des PAHs et croissance selon le mécanisme HACA.....15
Figure 1.7	Découpage des zones de combustion dans une turbine à gaz et CRN associé19
Figure 1.8	Structure de base des principaux CRN pour chambre de combustion de turbine à gaz.....21
Figure 1.9	Mesure de la distribution radiale en masse du carburant en sortie d'injecteur22
Figure 2.1	Schéma du PSR et paramètres associés30
Figure 2.2	Schéma du PFR et paramètres associés32
Figure 2.3	Distribution du mélange air-carburant dans les PSRs de la zone primaire36
Figure 2.4	Valeurs expérimentales du paramètre de mélange S collectées sur des chambres de combustion aéronautiques.....37
Figure 2.5	CRN complet pour turbines à gaz aéronautiques.....39
Figure 2.6	Algorithme d'exécution des calculs dans le CRN et sous-programmes associés43
Figure 3.1	CRN pour le système JSR/PFR de l'étude expérimentale de Marr et al. (1994).....57
Figure 3.2	Concentration massique en suies le long du PFR ₂ du système JSR/PFR.....58

Figure 4.1	Erreur relative sur les indices d'émissions de NO _x et de CO calculés en fonction du nombre de PSRs de la zone primaire.....	67
Figure 4.2	Émissions caractéristiques en sortie d'une turbine à gaz en fonction de la puissance moteur.....	68
Figure 4.3	$EINO_x\text{-num}$ en fonction du paramètre de mélange S	72
Figure 4.4	$EICO\text{-num}$ en fonction du paramètre de mélange S	73
Figure 4.5	Température totale en sortie des zones primaire (ZP) et secondaire (ZS) en fonction du paramètre de mélange S , configuration ralenti	74
Figure 4.6	Température totale en sortie des zones primaire (ZP) et secondaire (ZS) en fonction du paramètre de mélange S , configuration décollage	75
Figure 4.7	Profils normalisés de température totale, pression totale et vitesse en fonction du temps de résidence, configuration décollage.....	79
Figure 4.8	Évolutions de la température, pression et vitesse normalisées au sein des modules postchambre de l'« Advance Subsonic Engine » (Turbofan) en vol croisière.....	79
Figure 4.9	Évolution de la température et du temps de résidence des produits de combustion dans chaque zone du CRN, pour les quatre configurations étudiées	80
Figure 5.1	Évolution du diamètre moyen des particules de suie $D_p\text{-num}$ le long du CRN (configuration décollage, mécanisme HACA-Kazakov).....	89
Figure 5.2	Analyse de sensibilité sur le mécanisme de réactions de surface pour particules, dans le PSR de la zone primaire avec Elm maximal.....	90
Figure 5.3	Évolution de l'indice d'émissions en nombre de particules $Eln\text{-num}$ en fonction du paramètre de mélange S (mécanisme HACA-Kazalov modifié).....	94
Figure 5.4	Évolution du diamètre moyen des particules de suie $D_p\text{-num}$ en fonction du paramètre de mélange S (mécanisme HACA-Kazalov modifié).....	94
Figure 5.5	Évolution de l'indice d'émissions massiques $Elm\text{-num}$ en fonction du paramètre de mélange S (mécanisme HACA-Kazalov modifié)	95
Figure 5.6	Analyse de sensibilité sur la valeur de S calibrée ($S\text{-calib}$)	96
Figure 5.7	Évolution du diamètre moyen des particules de suie $Dp\text{-num}$ le long du CRN (configuration décollage ; mécanisme HACA-Kazakov modifié) ...	98

Figure 5.8	Évolution le long du CRN de la fraction molaire d'espèces chimiques intervenant dans le modèle de formation des suies (configuration décollage).....	100
Figure 5.9	Analyse du profil de température dans le PFR de la zone secondaire (ZS) pour deux modèles de dilution des gaz brûlés issus de la zone primaire (ZP).....	102

LISTE DES ABRÉVIATIONS, SIGLES ET ACRONYMES

0D / 1D	Non-dimensionnel / unidimensionnel
A	Approche
APEX	<i>Aircraft Particle Emissions eXperiment</i>
CC	Chambre de Combustion
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
CO	Monoxyde de carbone
CRN	<i>Chemical Reactor Network</i> (réseau de réacteurs chimiques)
D	Décollage
EI	<i>Emission Index</i> (indice d'émission)
exp	expérimental
GIEC	Groupe d'experts Intergouvernemental sur l'Évolution du Climat (traduction française de « <i>IPCC</i> »)
HACA	<i>H-Abstraction/C₂H₂- Addition</i>
IPCC	<i>Intergovernmental Panel on Climate Change</i>
JSR/PFR	<i>Jet-Stirred Reactor/Plug Flow Reactor</i> (Marr, 1993)
M	Montée
MEL	Mélangeur inerte
NO _x	Oxydes d'azote
num	numérique (relatif aux résultats obtenus dans ce mémoire)
OUT	<i>Outlet</i> (sortie de la chambre de combustion)
PAH	<i>Polycyclic Aromatic Hydrocarbon</i> (hydrocarbure aromatique polycyclique)
PFR	<i>Plug Flow Reactor</i> (réacteur à écoulement piston)

XXIV

Pmax	Puissance maximale du moteur
PSR	<i>Perfectly Stirred Reactor</i> (réacteur à mélange parfait)
POST-CC	Post-Chambre de Combustion
R	Ralenti (ou point fixe)
S-calib	Valeur calibrée du paramètre de mélange « S »
SO _x	Oxydes de soufre
TBP	Turbine Basse Pression
THP	Turbine Haute Pression
TUY	Tuyère
ZD	Zone de Dilution
ZP	Zone Primaire
ZS	Zone Secondaire

INTRODUCTION

Selon les résultats du Groupe d'experts Intergouvernemental sur l'Évolution du Climat (GIEC), près de 63 % de l'effet de serre dû au transport aérien serait attribué à des composés autres que le CO_2 (Lee et al., 2010), à savoir la vapeur d'eau, les oxydes d'azote (NO_x), de soufre (SO_x) et des particules (principalement des suies). Au-delà de l'action directe de chacun de ces composés sur le bilan radiatif de l'atmosphère, les particules ont également une action indirecte sur le climat. Elles modifient en effet la nébulosité des nuages de haute altitude en agissant comme noyau-support pour la formation de particules de glace (Kärcher et Yu, 2009) et favorisent la persistance des traînées de condensation issues des moteurs. Toutefois, de nombreuses incertitudes scientifiques entourent encore le processus de formation des particules aéronautiques de même que leur importance dans les changements climatiques (IPCC, 1999 ; 2007b). Ces interrogations ont conduit à un ensemble de campagnes expérimentales en vol (POLINAT, Schumann et al., 2000 ; SULFUR, Schumann et al., 2002) ou au sol (PARTEMIS, Wilson et al., 2004 ; APEX, Wey et al., 2007) afin de caractériser la nature des particules produites et leurs évolutions en sortie de moteur. Elles ont permis entre autres d'évaluer les quantités et les dimensions de ces particules ainsi que leurs rôles dans les processus microphysiques au sein des traînées de condensation. Ces études se sont concentrées sur les évolutions postmoteur des particules et peu d'entre elles ont analysé leur développement au sein des moteurs. La difficulté des mesures expérimentales dans cette zone en est la principale raison. Comprendre les phénomènes physico-chimiques qui se produisent dans le moteur et évaluer l'impact du processus de combustion sur les propriétés des particules apparaissent tous deux comme de véritables enjeux de recherche (CORAC, 2012).

La modélisation numérique s'avère être une solution économique et polyvalente pour répondre à ces enjeux. La modélisation actuelle des phénomènes de combustion au sein des moteurs par approche CFD 2D et 3D permet de reproduire avec précision les champs de température, pression et vitesse de l'écoulement ainsi que la distribution spatio-temporelle

des espèces chimiques au sein du domaine d'étude. Toutefois, l'emploi des méthodes CFD peut entraîner des temps de calculs significatifs pouvant aller jusqu'à plusieurs jours, notamment lorsque des cinétiques chimiques complexes de combustion du carburant ou de formation des polluants sont employées. Par conséquent, ces cinétiques doivent être simplifiées pour réduire ce temps de calcul au détriment des espèces considérées. Afin d'éviter ces simplifications, de nouvelles méthodes complémentaires à la CFD pour l'étude de la combustion et la formation des émissions polluantes au sein des moteurs ont été développées. Elles reposent sur une représentation multizones de la chambre de combustion dans lesquelles l'évolution de l'écoulement réactif peut être supposée, soit non dimensionnelle (0D), soit unidimensionnelle (1D). Ces zones sont modélisées par des réacteurs chimiques idéaux 0D ou 1D qui, liés entre eux, constituent un modèle numérique dit par réseau de réacteurs chimiques. Cette représentation 0D/1D offre un bon compromis entre précisions et temps de calcul, permettant ainsi de se concentrer sur la chimie plutôt que sur la structure détaillée de l'écoulement. Le gain de temps apporté par cette méthode permet d'envisager ultérieurement le développement d'études paramétriques portant sur les données moteur, les conditions de vol, la nature du carburant et leurs répercussions sur les émissions polluantes dont notamment les particules.

C'est dans ce contexte que s'inscrit le présent mémoire. Le but visé par cette étude est de développer un modèle 0D/1D de combustion dans les turbines à gaz aéronautiques par réseau de réacteurs chimiques et d'évaluer sa capacité à reproduire les émissions de particules de suie à travers différentes configurations de vol. Pour parvenir à cet objectif, l'étude menée dans ce mémoire sera articulée autour de cinq chapitres.

Dans le premier chapitre, une revue de littérature sera menée sur les modèles permettant décrire la formation et l'évolution des particules de suie dans un processus de combustion, puis sur les modèles 0D/1D de combustion dans les turbines à gaz existants.

Le deuxième chapitre portera sur le développement d'un modèle 0D/1D de combustion et de postcombustion pour turbines à gaz aéronautiques via la méthode du réseau de réacteurs

chimiques (CRN). Les fondements théoriques, les choix de modélisation et les hypothèses associés au CRN proposé dans ce mémoire seront définis ainsi que les moyens numériques employés.

Le troisième chapitre présentera les mécanismes chimiques de combustion du carburant et de formation des particules de suie qui seront couplés au modèle de CRN. Ces mécanismes permettront le calcul des grandeurs thermodynamiques et des concentrations en espèces chimiques au sein du CRN.

Le quatrième chapitre constituera l'étape de calibration puis de validation du modèle de CRN pour turbines à gaz aéronautiques. Cette étape de validation s'appuiera sur l'analyse des produits de combustion et des grandeurs thermodynamiques calculées pour plusieurs configurations de vol. La calibration et la validation du CRN seront conduites à l'aide de données issues d'une étude expérimentale de référence sur les émissions de particules aéronautiques (APEX-1).

Le cinquième chapitre sera consacré à l'exploitation du modèle de CRN pour l'étude des émissions de particules de suie. La qualité des résultats de simulation sur plusieurs configurations de vol sera par la suite analysée et discutée par rapport à l'étude expérimentale APEX-1.

Ce dernier chapitre sera suivi par une conclusion qui mettra en avant les points importants du mémoire et les résultats significatifs. Par la suite, des recommandations seront émises.

CHAPITRE 1

REVUE DE LITTÉRATURE

1.1 Composition et formation des émissions polluantes dans une turbine à gaz.

Cette partie vise à présenter les différents types d'émissions polluantes produits par les turbines à gaz aéronautiques ainsi que l'origine et le principe de leur formation. Une attention particulière sera portée à l'architecture de la chambre de combustion, des modules postchambre (turbines et tuyère) et leurs interactions avec la formation des polluants.

1.1.1 Préambule : architecture d'une turbine à gaz aéronautique

La plupart des systèmes de propulsion aéronautiques actuels (turboréacteur, turbopropulseur, turboréacteur à double flux...) fonctionnent selon le principe de la turbine à gaz. Celle-ci est composée dans sa configuration minimale de trois éléments que sont le compresseur, la chambre de combustion et la turbine. Son fonctionnement repose selon le principe suivant :

- 1) L'air est aspiré puis comprimé à travers le compresseur. Sa température s'élève en même temps que sa pression.
- 2) Cet air comprimé et chaud débouche dans la chambre de combustion, où il est mélangé avec du carburant puis enflammé. La combustion du mélange produit ainsi une masse de gaz avec une énergie thermique élevée (plusieurs dizaines de mégajoules pour les plus grandes turbines à gaz).
- 3) Les gaz de combustion produits vont par la suite se détendre au travers de la turbine et l'entraîner ainsi en mouvement. L'énergie mécanique de rotation produite sur l'arbre de la turbine servira à son tour à l'entraînement du compresseur.

Dans le cas spécifique des turbines à gaz employées en aéronautique, des éléments additionnels s'ajoutent aux trois modules évoqués. Dans la configuration de moteur dite de « turbofan » qui est à l'heure actuelle la plus répandue en propulsion aéronautique (schématisé par la Figure 1.1), on ajoute à l'entrée du moteur une soufflante qui crée l'essentiel de la force de poussée (via éjection d'un débit massique d'air élevé), puis on

intègre en sortie de moteur une tuyère d'éjection qui permet de développer une force de poussée résiduelle (la tuyère transforme l'énergie thermique des gaz en énergie cinétique).

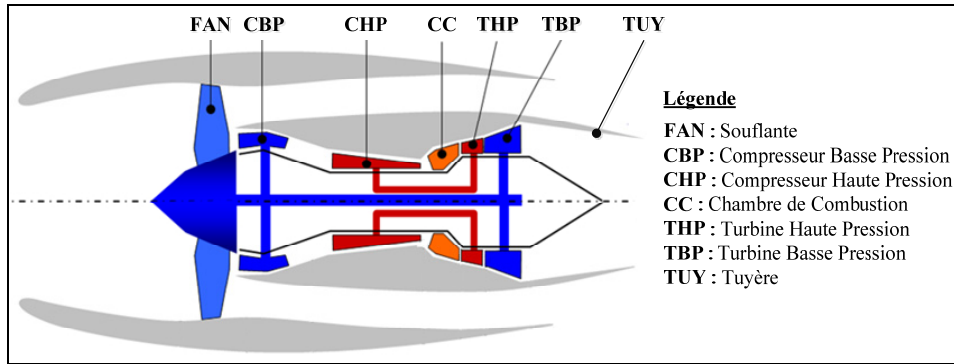


Figure 1.1 Vue en coupe d'un turboréacteur à double flux (« turbofan »)

Au sein de ces turbines à gaz, la formation des espèces polluantes (CO_x , NO_x , SO_x , particules de suie, etc.) dues à la combustion du mélange air-carburant se produit principalement dans la chambre de combustion et la partie postchambre du moteur, à savoir les turbines et la tuyère. Il convient donc de s'intéresser plus en détail à ces éléments.

Chambre de combustion

Sur la Figure 1.2 sont illustrés les principaux éléments constitutifs d'une chambre de combustion de turbine à gaz. L'air provenant du compresseur est dans un premier temps décéléré par le diffuseur pour permettre l'établissement d'une flamme de diffusion turbulente continue dans la chambre. Dans le mode d'opération normal d'un turboréacteur, le ratio global de la masse d'air sur celle de carburant (AF) est généralement compris entre 45:1 et 130:1 (Rolls-Royce, 1996) et équivaut à des richesses du mélange air-carburant (ϕ) situées entre 0.33 et 0.11. Il est à rappeler que la richesse est définie par le ratio air/carburant actuel sur le ratio air/carburant qui conduit à une combustion complète du carburant injecté (condition dite de « stœchiométrie »). Un mélange avec un excédent de carburant ($\phi > 1$) sera défini comme « riche », tandis qu'un mélange avec un excès d'air ($\phi < 1$) sera défini comme « pauvre ».

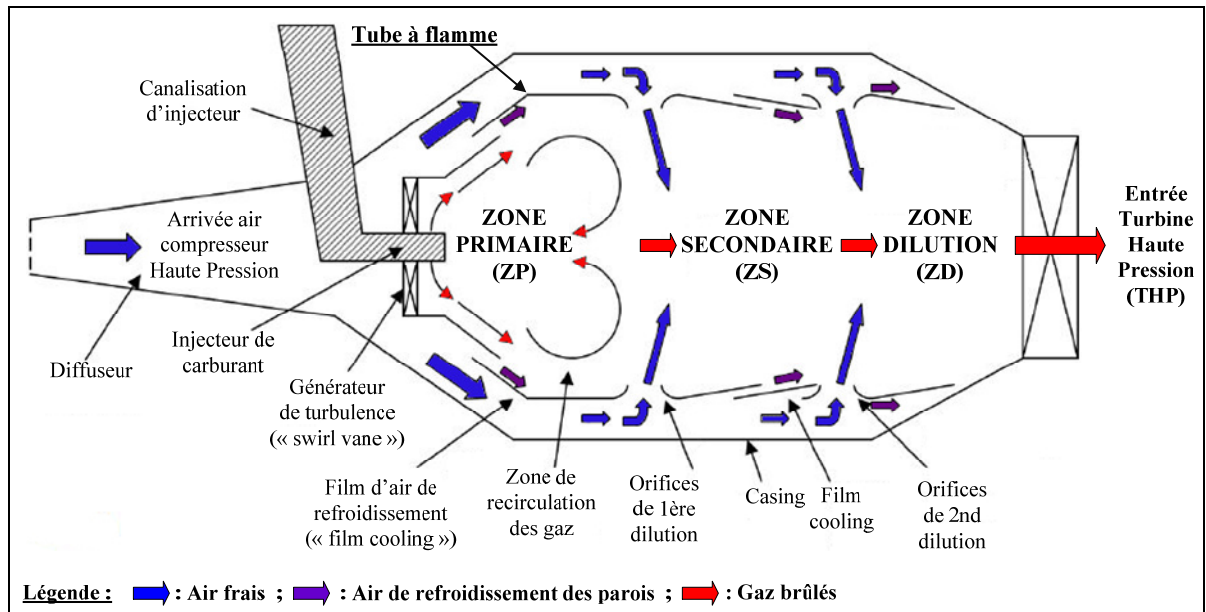


Figure 1.2 Schéma d'une chambre de combustion de turbine à gaz
Adaptée de Chang (2012, p. 11)

Ces ratios globaux AF sont cependant loin de celui d'un mélange stœchiométrique du kérosène (carburant aéronautique) qui a un ratio de l'ordre de 15:1 et ne permettent pas d'obtenir l'inflammation du mélange air-carburant. Par l'intermédiaire du tube à flamme (indiqué sur la partie supérieure de la Figure 1.2) et de ses multiples orifices où l'air peut s'introduire, il est possible de jouer localement sur la distribution du ratio air-carburant au sein de la chambre de combustion afin d'avoir une flamme stable et de créer des zones propices à une combustion optimale du mélange. On distingue dès lors trois zones principales au sein de la chambre de combustion :

- Zone Primaire

La zone primaire (ZP) a la principale fonction d'ancrer la flamme et de fournir suffisamment de temps, de température et de turbulence pour parvenir à une combustion complète du mélange (Lefebvre et Ballal, 2010). Dans cette zone où est injecté entre 20 et 30 % du débit d'air total (Keating, 2007), la richesse moyenne ϕ_{ZP} du mélange air-carburant atteint des valeurs proches de l'unité, ceci pour favoriser l'inflammation et la stabilité de la flamme. Parallèlement à cette richesse, la présence en amont d'un orifice générateur de turbulence (« swirl vane ») permet la création de zones de recirculation de

l'écoulement qui contribuent quant à elle à l'homogénéisation du mélange, mais aussi au maintien de la flamme.

- Zone Secondaire (ou intermédiaire)

La zone secondaire (ZS) débute à partir des orifices de première dilution. Sa fonction est double. Premièrement, elle fournit l'air pour l'oxydation de l'ensemble des radicaux (CO, H...) et des particules de suie produites dans la zone primaire (de Blas, 1998) via l'apport d'air par les orifices de dilution. Deuxièmement, elle réduit la température des gaz pour que ceux-ci ne détériorent pas les étages de turbine en aval. En altitude, lorsque la pression diminue et par conséquent la vitesse des réactions chimiques aussi, la zone secondaire joue également le rôle d'extension de la zone primaire (Kirk, 2012).

- Zone de Dilution

Dans cette dernière zone, l'air de dilution restant ainsi que l'air de refroidissement des parois du tube à flamme y sont injectés. Entre 20 et 40 % du débit d'air total est introduit dans cette zone (Kirk, 2012). La zone de dilution a pour objectif d'établir un profil de température transversal uniforme en sortie de chambre qui soit non dommageable pour les premiers étages de turbine (Lefebvre et Ballal, 2010).

Le temps de résidence des gaz brûlés dans l'ensemble de ces trois zones est de l'ordre de quelques millisecondes (Shakariyants, 2008 ; Zakharov et al., 2009).

Turbines et tuyère

- Turbines

Les étages de turbine transforment l'énergie thermique et de pression des gaz brûlés provenant de la chambre de combustion en un travail mécanique de rotation. Cette détente des gaz est réalisée au moyen d'une succession d'aubes fixes (stator) puis mobiles (rotor) qui convertissent l'énergie potentielle en énergie cinétique. L'ensemble stator et rotor forment ce que l'on nomme un étage de turbine.

Dans la suite de ce mémoire, on désignera par la notion de « module turbine » un ensemble composé de n étages de turbine.

- Tuyère

Les turbines à gaz aéronautiques sont équipées d'une tuyère en sortie des modules turbine. Celle-ci n'est autre qu'un canal convergent (ou convergent puis divergent) qui permet de poursuivre la détente des gaz jusqu'à la pression atmosphérique extérieure. L'objectif de la tuyère est de maximiser par cette détente la vitesse d'éjection des gaz de combustion et de produire de ce fait une force de poussée maximale.

1.1.2 Composition et formation des émissions polluantes

Les produits de combustion émis par une turbine à gaz sont composés en général de : dioxyde de carbone (CO_2), vapeur d'eau (H_2O), hydrocarbures imbrûlés (UHC), monoxyde de carbone (CO), oxydes d'azotes (NO_x), oxydes de soufre (SO_x), particules (suies) ainsi que l'oxygène (O_2) et l'azote atmosphérique (N_2) qui sont eux présents en excès.

Le CO_2 et H_2O sont une conséquence naturelle de la combustion de tout hydrocarbure. Les UHC, le CO et les particules de suie prennent leur origine dans les régions où la combustion est incomplète. Il s'agit des zones où la richesse locale du mélange est trop élevée ou trop faible pour une combustion complète, par exemple en proche paroi de la chambre de combustion ou dans certaines régions de la zone primaire comme illustrées à la Figure 1.3 montrant les zones de production et d'oxydation des principaux polluants. Dans le cas spécifique des suies, celles-ci apparaissent généralement pour des valeurs de richesses supérieures à 1.5 (Kiamah, 2003 ; Martini, 2008). Elles peuvent aussi être produites par pyrolyse du carburant liquide ou de fractions d'hydrocarbures gazeux (Shakariyants, 2008). Après leur formation, le CO, les UHC et les suies sont essentiellement oxydés dans les régions à haute température de la zone secondaire et de dilution (Figure 1.3).

Les NO_x (majoritairement NO, NO_2 et N_2O) suivent pour leur part deux voies principales de formation : la voie des « NO_x rapides », dans les régions riches ($\phi > 1$) où les fractions d'hydrocarbures issues de la décomposition du carburant réagissent avec l'azote atmosphérique ; la voie des « NO_x thermiques », dans les zones de la chambre désignées sur

la Figure 1.3 où la température est suffisamment élevée ($> 1800\text{ K}$) pour permettre la fixation de l'azote présent dans l'air (Sturgess, McKinney et Morford, 1993).

Pour ce qui est des SO_x , leur présence dans les produits de combustion résulte de l'oxydation du soufre contenu en faible quantité dans la plupart des carburants aéronautiques (concentration en masse de l'ordre de 500 ppm, Lefebvre et Ballal, 2010).

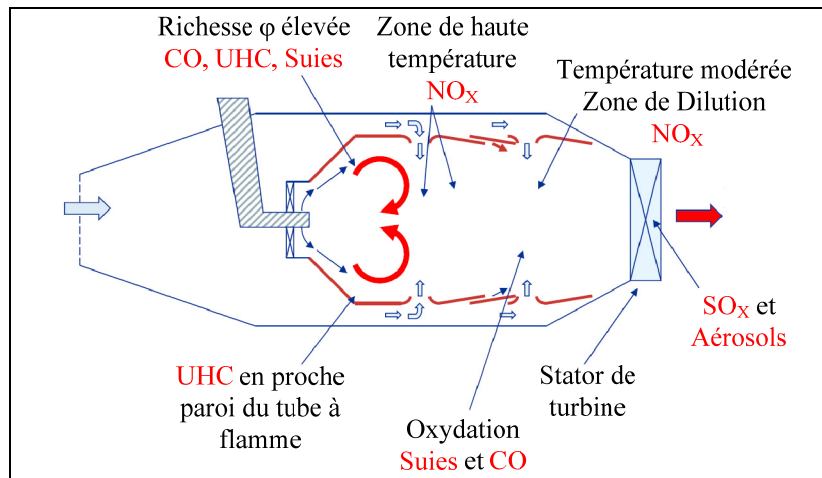


Figure 1.3 Formation des principaux produits de combustion au sein d'une chambre de combustion de turbine à gaz
Adaptée de Chang (2012, p. 12)

En sortie de chambre, les réactions chimiques associées au processus de combustion et à la formation des émissions polluantes sont pour l'ensemble figées. Ceci tient à l'abaissement en température des gaz brûlés causé par les dilutions successives avec l'air frais en amont. Toutefois, pour les régimes moteur de forte puissance tel que le décollage, la température des gaz brûlés en sortie de chambre est suffisamment élevée pour que l'oxydation des CO_x , NO_x , SO_x et des dérivés de ces espèces se poursuive dans les premiers étages de turbines (Lukachko et al., 2008 ; Starik et al., 2002). Parallèlement aux réactions d'ordre chimique, l'abaissement de la température et de la pression des gaz brûlés au travers des modules postchambre (turbines et tuyère) donne lieu à des phénomènes d'ordre physique tels que la condensation de la vapeur d'eau, qui combinée aux émissions de SO_x et NO_x donnent naissance à des précurseurs d'aérosols (principalement de l'acide sulfurique H_2SO_4 et de l'acide nitrique HNO_3 , Lukachko et al., 2008).

1.1.3 Caractérisation des émissions de particules de suie

Les suies constituent la principale source d'émissions en masse de particules dans un panache d'avion. La notion de suie se réfère à un agrégat de particules généralement sphériques à haute teneur en carbone (ratio Carbone/Hydrogène ≥ 8 , Wang et Cadman, 1998). Elles sont constituées principalement de carbone graphite et de composés organiques tels que certains aromatiques présents dans le carburant ou produits lors la combustion (Frenklach et Wang, 1991). Leurs dimensions peuvent varier du nanomètre à quelques centaines de nanomètres dans le cas des suies d'origine aéronautique et ont généralement une distribution de taille du type log-normale, avec une majorité de particules située dans la gamme 20-30 nm (Kinsey, 2009). Les concentrations moyennes en particules pour des avions commerciaux actuels, mesurées en proche sortie du moteur (à moins de 10 m de la sortie) oscillent généralement entre 10^{14} - 10^{16} particules (#) de suies par kg de carburant consommé (kg-fuel) (Schumann et al., 2002 ; Timko et al., 2010 ; Wey et al., 2007). Ces concentrations tendent à diminuer avec des moteurs plus récents (par exemple du type CFM56-7) et peuvent atteindre des seuils allant de 10^{13} - 10^{14} #/kg-fuel (Timko et al., 2010). En ce qui concerne les indices d'émissions massiques (masse de particules produites par kg de carburant), leurs valeurs varient de quelques mg/kg-fuel à faible puissance moteur jusqu'à plusieurs centaines de mg/kg-fuel au décollage. Toutefois, ces valeurs ne sont pas universelles et dépendent du moteur étudié.

Comme illustré à la Figure 1.4, ces particules de suie peuvent interagir par la suite dans le panache des gaz moteur avec des composés volatils (H_2O , SO_3 , H_2SO_4 , HNO_3) également présents dans les gaz brûlés. Lorsque ces composés sont à l'état liquide, ceux-ci peuvent venir se déposer autour des particules de suie et former ainsi une couche liquide autour de celles-ci (particules de suie enduites sur la Figure 1.4) (Kärcher et Yu, 2009). Ce recouvrement va par la suite « activer » la particule de suie, c'est-à-dire la rendre hydrophile (les particules de suie non enduites étant hydrophobes à la base (Vancassel, 2003)) et permettra ultérieurement la condensation ou la solidification de l'eau présente dans l'atmosphère autour de ces particules (formation de nuages de particules de glace).

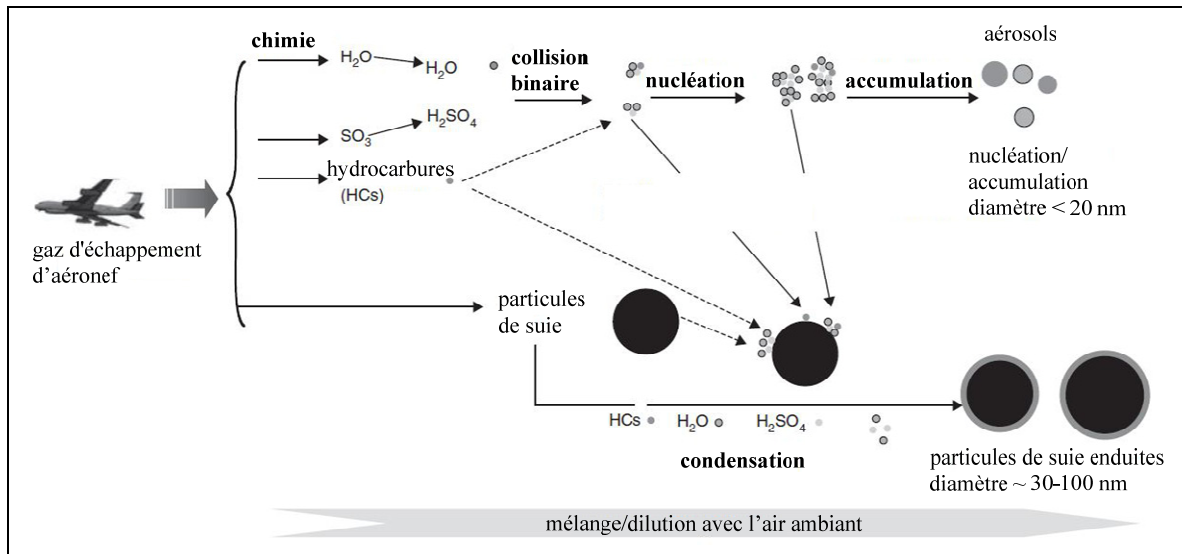


Figure 1.4 Formation, interaction et croissance dans le sillage d'un avion des particules émises par les moteurs
Adaptée de Whitefield et al. (2008, p. 7)

1.2 Théories sur la formation des particules de suie et modélisation.

Après cette introduction sur le fonctionnement des turbines à gaz aéronautiques et le principe de formation des polluants qu'elles émettent, la présente partie s'intéresse plus spécifiquement aux émissions de particules de suie et aux mécanismes physico-chimiques de leur formation. La revue de littérature menée ici vise à introduire les différentes étapes de formation des suies et de leurs précurseurs et traite des principales théories qui sont associés.

1.2.1 Processus global de formation

Il a été vu plus haut que les émissions de particules de suie sont la conséquence de conditions de température, richesse, turbulence et temps de résidence dans la chambre de combustion qui ne sont pas favorables à une combustion complète du carburant. Le mécanisme de leur production repose sur une transition de phase gaz-solide au sein de la flamme, où des espèces précurseurs gazeuses se transforment en particules ultra-fines de carbone solides. La modélisation de ce mécanisme nécessite de considérer simultanément des aspects de

combustion, chimie des hydrocarbures ou encore de dynamique des aérosols et met en jeu des échelles de temps de réaction et de dimensions des espèces produites relativement étendues, comme le présente la Figure 1.5 illustrant le processus de formation des suies. À cela s'ajoutent plusieurs sous-étapes dans la formation des particules et de leurs précurseurs qui ne sont pas encore entièrement caractérisées et qui font toujours l'objet d'études à l'heure actuelle. Néanmoins, il est possible d'identifier dans le processus global de formation des suies des étapes majeures qui sont pour leur part assez bien définies. On peut dénombrer quatre étapes principales qui sont :

- 1) la formation des précurseurs de particules, notamment les hydrocarbures polycycliques aromatiques (PAHs) et la croissance de ces précurseurs ;
- 2) la nucléation des particules ;
- 3) les réactions de surface ;
- 4) la coagulation et l'agrégation des particules.

Ces étapes sont également représentées individuellement sur la Figure 1.5.

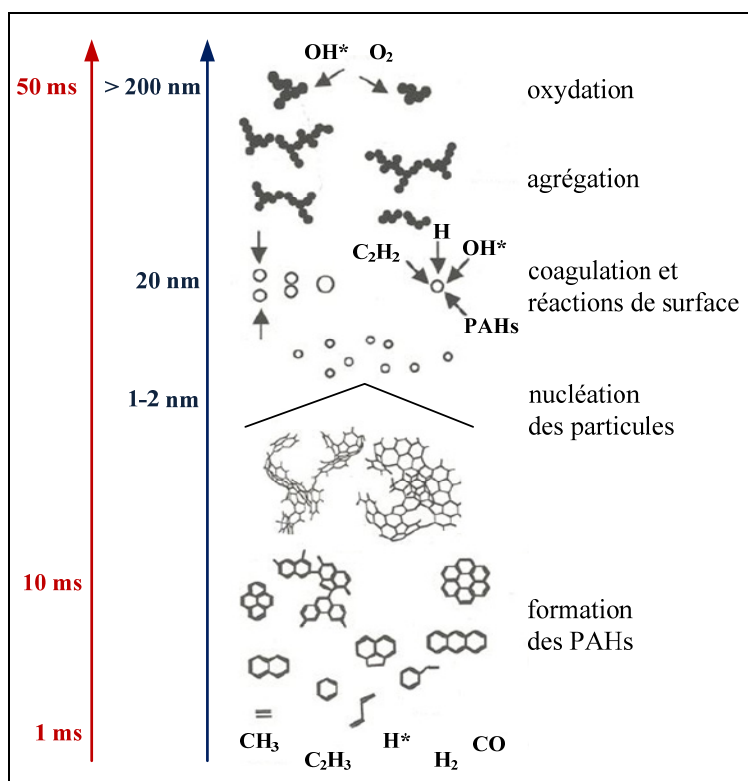


Figure 1.5 Étapes majeures dans la formation des suies
Adaptée de Chung (2011, p. 3)

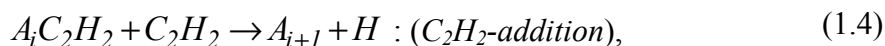
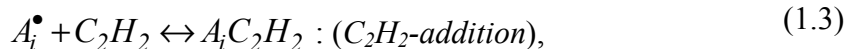
1.2.2 État de l'art sur les mécanismes de formation des suies

Cette rubrique constitue une synthèse des principaux modèles rencontrés dans la littérature permettant de décrire le processus de formation des suies.

Formation des précurseurs de suies

De nombreuses études aussi bien numériques qu'expérimentales s'accordent sur le fait que les hydrocarbures polycycliques aromatiques (PAHs) peuvent être considérés comme les principaux précurseurs de suies (Agafonov et al., 2008 ; Frenklach, 2002b ; Richter et al., 2005 ; Violi, D'Anna et D'Alessio, 1999).

La première étape dans le processus de formation des PAHs est la constitution du premier anneau d'aromatique (A_1), généralement le benzène (C_6H_6) ou ses dérivées comme le radical phényle (C_6H_5-R), au travers de réactions qui mettent en jeu de petits hydrocarbures aliphatiques (hydrocarbures à chaîne carbonée linéaire) issus de la décomposition du carburant. Une fois le premier anneau d'aromatique (A_1) formé, celui-ci va croître essentiellement en masse moléculaire selon un mécanisme de fixation des molécules d'acétylène nommée HACA (« H-Abstraction/C₂H₂ Addition »), introduit par Frenklach et al. (1985). Les réactions constitutives de ce mécanisme sont les suivantes (adaptées de Frenklach, 2002b, p. 2030),



avec

A_i , A_i^\bullet : PAH à i cycles de carbone et son radical.

Cette croissance du nombre de cycles de la molécule de PAH schématisée par la Figure 1.9 se poursuit dans une majorité de modèles actuels jusqu'au pyrène (4 cycles) ou coronène (7 cycles) (Frenklach, 2002b ; Starik, 2008).

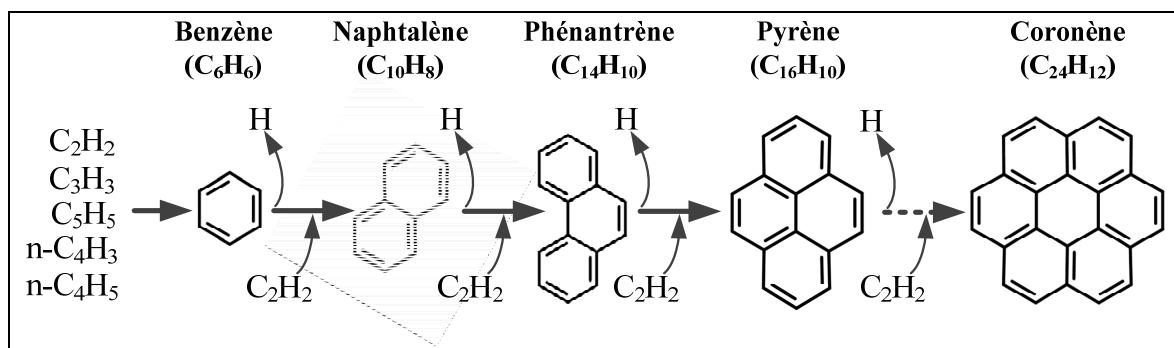


Figure 1.6 Formation des PAHs et croissance selon le mécanisme HACA

Nucléation des particules

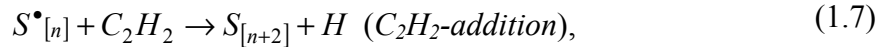
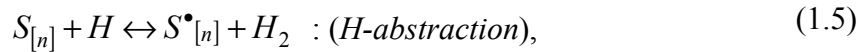
La nucléation est le processus qui donne naissance à la particule de suie solide depuis les PAHs sous forme gazeuse. Expérimentalement, la plus petite particule de suie qui puisse être détectée a un diamètre de l'ordre du nanomètre et possède une masse moléculaire proche de 2000 u (Zamuner et Dupoirieux, 2000) ($1u = 1.660538 \text{ E-}27 \text{ kg}$). Cependant certains auteurs suggèrent que la création de la première particule solide aurait lieu à des masses moléculaires plus faibles, de l'ordre de 300 u (Warnatz, Maas et Dibble, 2006). Ces différentes considérations sur la valeur de la masse moléculaire à partir de laquelle le nucléus de particule se forme ont donné lieu à tout un ensemble de théories sur la nucléation des suies (cf. travaux d'Homman, 1998 ; Wang, 1991 et Miler, 1991 ; Richter et al., 2000 et Violi et al., 2004). Il est actuellement le processus le moins compris dans le mécanisme global de formation des particules (Frenklach, 2002b).

Il ressort de l'analyse de la littérature que le modèle de formation de la première particule par dimérisation de deux molécules de pyrène ($\text{C}_{16}\text{H}_{10}$) est celui qui est généralement employé et qui donne d'assez bons résultats en comparaison à des études expérimentales (Chung, 2011). Toutefois, de récentes études (Chung, 2011 ; Wen et al., 2005) ont mis en avant que l'unique

réaction de nucléation par dimérisation du pyrène peut conduire à une sous-estimation du nombre de particules produites. Ces auteurs suggèrent qu'un modèle plus précis de nucléation devrait tenir compte de plusieurs réactions de dimérisation en parallèle de celle du pyrène, avec notamment des molécules de masse molaire supérieure telles que le coronène ($C_{24}H_{12}$).

Réactions de surface

La croissance en masse des particules et leur oxydation est essentiellement pilotée par des réactions de surface hétérogènes (solide-gaz) qui contribuent à plus de 95 % dans l'apport en masse de la particule (Warnatz, Maas et Dibble, 2006). Cette croissance est supposée suivre un mécanisme assez similaire à celui des PAHs évoqués plus haut, avec notamment l'apport d'acétylène (C_2H_2) en surface de la particule via le mécanisme HACA de Frenklach et Wang (1991), cette fois adapté au cas des particules de suie. Les réactions de ce mécanisme sont énumérées ci-dessous (adaptées de Wang (2011, p. 52)).



avec

$S_{[n]}$, $S^{\bullet}_{[n]}$: particule de suie à n atomes de carbone et son radical.

Cependant, des études aussi bien expérimentales (Marr, 1993) que numériques (Wen et al., 2005 ; Zhang et al. 2009) ont mis en évidence que la voie de croissance par fixation de l'acétylène n'est pas toujours celle qui prédomine et que la condensation des PAHs en surface des suies s'avère être dans certains cas la voie dominante de croissance (température ≥ 2000 K ; richesse $\varphi \geq 2$ et concentration en C_2H_2 faible), avec une contribution dans l'apport en masse qui peut atteindre près de 85 % (Marr, 1993).

L'oxydation des particules quant à elle est essentiellement due à la présence du radical OH (Echavarria et al., 2012 ; Neoh, Howard et Sarofim, 1985 ; Xu et al., 2003), notamment au front de flamme et dans les régions de combustion riche. Il convient néanmoins de tenir compte des voies d'oxydation secondaires telles que celle par O_2 , surtout dans le cas des chambres de combustion de turbine à gaz, où les fortes températures et les dilutions d'air successives sont favorables à ce type d'oxydation pour les suies (Flagan et Seinfeld, 1988).

Coagulation et agrégation des particules

Parallèlement aux réactions de surfaces, les particules de suie de par leur mouvement aléatoire entrent en collision et s'assemblent pour former une particule de taille supérieure. Lorsque la taille des particules est suffisamment petite (dans le cas des suies jusqu'à environ 20 nm, Chung, 2011) la collision entre deux particules résulte en la formation d'une seule et même particule plus grande, généralement sphérique également. Cette fusion (ou coalescence) des particules est ce que l'on nomme la coagulation. Lorsque les particules sont suffisamment grandes et/ou lorsque leur énergie de surface devient plus faible, le processus de coagulation laisse place à celui de l'agrégation des particules (ou agglomération), où ces dernières se lient sous forme de chaînes pouvant adopter des structures fractales (Jensen, Suo-Anttila et Blevins, 2007).

Pour modéliser l'interaction entre les particules et déterminer numériquement leurs propriétés (diamètre, nombre, masse, etc.), deux méthodes sont généralement envisageables : la méthode par section et la méthode des moments. La première s'appuie sur une représentation discrète de la population de particules sous forme d'intervalles de dimension ou de masse ; la deuxième ne s'intéresse qu'aux propriétés moyennes de la population totale de particules. En cela, la méthode par section est plus précise et plus riche en informations que celle par les moments. Toutefois cette méthode requiert un nombre de sections minimales pour parvenir à un bon niveau de précision et éviter certaines erreurs d'ordre numérique (diffusion). Cette précision apporte un coût de calcul qui est très supérieur à celui de la méthode des moments. Les modèles de croissance par agrégation sont quant à eux empruntés aux modèles de dynamique des aérosols et de physique probabiliste (simulation par modèles du type Monte-Carlo) (Frenklach, 2002b).

1.3 Modèles 0D/1D de prédiction des émissions polluantes dans les turbines à gaz

La revue de littérature menée dans cette partie dresse un bilan actuel sur la modélisation 0D et/ou 1D des processus de combustion dans les turbines à gaz, notamment via le concept de réseau de réacteurs chimiques (CRN). Les principaux types de modèles pour turbines à gaz rencontrés dans la littérature seront présentés et il sera discuté de la qualité des prédictions sur les émissions polluantes obtenues.

1.3.1 Concept de réseau de réacteurs chimiques (CRN)

La modélisation par réseau de réacteurs chimiques, comme souligné en introduction, est une voie parallèle aux méthodes CFD pour l'étude des processus de combustion et de formation des émissions polluantes. Cette méthode repose sur un découpage de la zone de combustion en plusieurs régions, dans lesquelles les variables physiques et chimiques de l'écoulement varient peu (Rezvani, 2010) et où leurs évolutions peuvent être supposées soit non dimensionnelle (0D), soit unidimensionnelle (1D). À chacune de ces régions identifiées, on associe par la suite un réacteur chimique idéal 0D ou 1D pour modéliser ces évolutions physico-chimiques. Ces réacteurs sont dans un second temps reliés entre eux pour former un réseau dans lequel les connexions reposent sur la structure de l'écoulement au sein de la chambre de combustion. Ce lien entre l'architecture du CRN et l'écoulement est mis en évidence sur la Figure 1.7, où est représenté le découpage principal de la zone de combustion dans une chambre de turbine à gaz et le CRN associé. On peut remarquer que les réacteurs sont reliés entre eux par des flux de matière provenant soit des autres réacteurs, soit par des points d'entrée d'alimentation en fluide. Sur cette même Figure 1.7, la notion de « PSR » (« Perfectly Stirred Reactor ») fait référence à un réacteur à mélange parfait non dimensionnel et celle de « PFR » (« Plug Flow Reactor ») à un réacteur à écoulement piston unidimensionnel. Le paramétrage de ces deux réacteurs chimiques et les équations qui les régissent sont relativement simples et expliquent entre autres leur choix fréquent dans la littérature comme « brique élémentaire » pour la construction des CRNs.

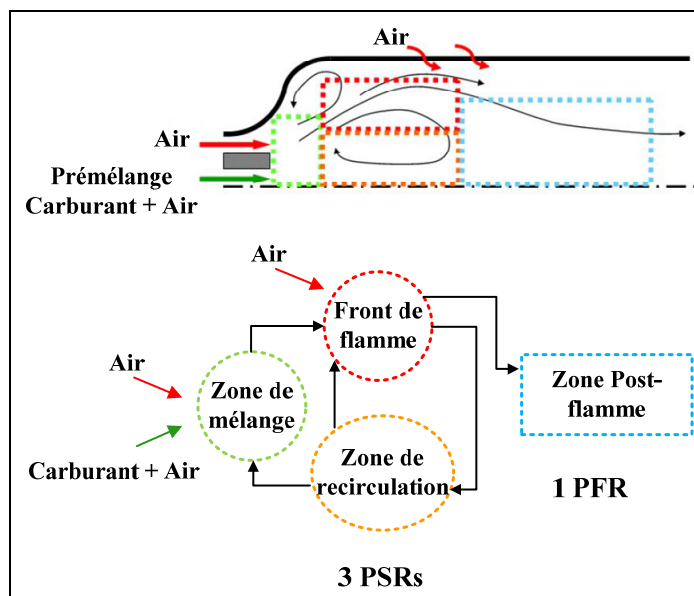


Figure 1.7 Découpage des zones de combustion dans une turbine à gaz et CRN associé
Adaptée de Reaction-Design (2013b, p. 117)

Une fois la structure du réseau de réacteurs définie, on joint au CRN une cinétique chimique de combustion du carburant ou de formation des polluants pour obtenir les concentrations en espèces et la température de l'écoulement en sortie de chaque réacteur (Rezvani, 2010). La simplification sur la modélisation de l'écoulement apportée par le concept de CRN permet un gain de temps significatif sur le temps de calcul et une analyse plus fine des phénomènes chimiques via l'emploi de cinétiques détaillées, comparativement aux méthodes CFD où l'accent est principalement mis sur une représentation fidèle de l'écoulement, au détriment de la chimie (Rezvani, 2010).

Les rubriques suivantes s'intéressent désormais à l'emploi des PSRs et PFRs dans la modélisation des chambres de combustion de turbine à gaz et plus spécifiquement l'agencement de ces réacteurs pour représenter la zone primaire. C'est en effet dans cette zone que l'essentiel du processus de combustion s'opère de même que la formation des principaux polluants (CO, NO_x, suies). Une attention particulière doit donc être portée à sa modélisation.

1.3.2 CRN avec zone primaire mono- ou biréacteurs

La zone primaire de la chambre de combustion est une région où les phénomènes de turbulence et de recirculation de l'écoulement sont significatifs. Ceux-ci conduisent à avoir un temps caractéristique de mélange t_{mix} relativement court par rapport au temps chimique t_{chem} des réactions. En terme de nombre adimensionnel caractéristique de la combustion, cette configuration correspond à des nombres de Damkhöler (Da) relativement faibles (Allaire, 2006), avec Da défini par

$$Da = \frac{t_{mel}}{t_{chim}}, \quad (1.8)$$

où

t_{mel} : temps caractéristique associé aux phénomènes de mélange (diffusion, convection...),

t_{chim} : temps caractéristique associé aux réactions chimiques.

Le modèle de PSR, qui suppose un mélange parfait instantané (c.-à-d. $Da = 0$), apparaît comme le premier modèle envisageable pour cette zone. À l'inverse, l'écoulement dans la zone de dilution tend à avoir une évolution globale 1D selon l'axe longitudinal de la chambre. Le modèle de PFR semble être ici le meilleur candidat pour représenter cette zone.

En ce qui concerne la zone secondaire, le choix de représentation diverge selon les auteurs. Certains justifient une intensité de turbulence suffisamment élevée dans cette zone (c.-à-d. $t_{mel} \ll t_{chim}$ et donc $Da \rightarrow 0$) pour la modéliser par un PSR (Rezvani, 2010 ; Swithenbank et al., 1973). D'autres au contraire considèrent qu'un profil unidimensionnel de l'écoulement peut être déjà supposé établi dans cette région (Allaire, 2006 ; Facchini, 2004 ; Rizk, 2002) et suggèrent par conséquent l'emploi d'un PFR.

La mise en série de ces trois réacteurs constitue le squelette de base des principaux CRN pour chambre de combustion de turbine à gaz. Une illustration de ce CRN est donnée à la Figure 1.8. On remarquera sur ce schéma l'ajout d'une boucle de retour des gaz en sortie du PSR de la zone primaire. Celle-ci permet de tenir compte des effets de recirculation dans cette région.

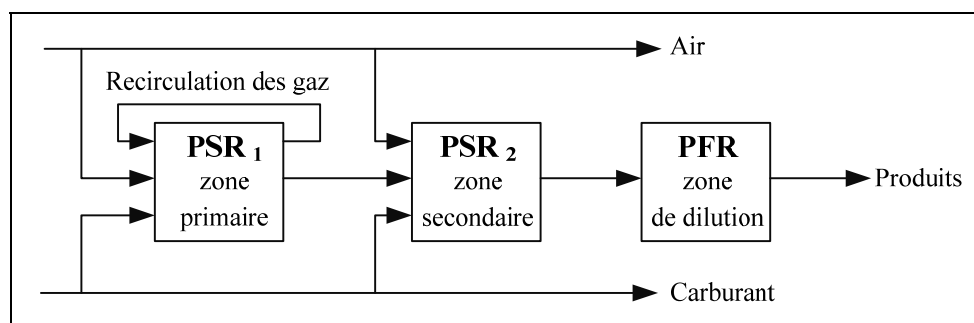


Figure 1.8 Structure de base des principaux CRN pour chambre de combustion de turbine à gaz
Adaptée de Swithenbank et al. (1973, p. 628)

De ce CRN de base ont découlé plusieurs autres modèles plus complexes, avec notamment des structures parallèles. L'ajout de PSRs ou PFRs en parallèle permet par exemple de tenir compte des différences de température et de composition dans l'écoulement entre le cœur de la chambre et la proche paroi (cas des CRNs de Facchini, 2004 ; Roby et al., 2003 ; Rizk, 1993 ; Shakariyants, 2008). D'autres modèles subdivisent certaines régions comme la zone primaire en deux réacteurs (en série ou en parallèle), pour prendre en considération soit les variations de richesse du mélange entre la sortie de l'injecteur de carburant et le reste de la zone primaire (CRNs de Shakariyants, 2008 ; Swithenbank et al., 1973), soit pour modéliser l'interface du front de flamme et les conditions particulières en amont et aval de celui-ci (modèles de Lebedev et al., 2009 ; Zakharov et al., 2009). Dans le cas particulier du modèle de Zakharov et al. (2009), ces derniers sont parvenus à reproduire à l'aide d'un mécanisme simplifié de combustion du kérosène (JP10) les seuils d'émissions en NO_x d'une chambre de combustion expérimentale, pour un gamme de pression allant de 1 à 20 atm, avec une marge d'erreur relative comprise entre 20 et 30 % sur toute la gamme de pressions étudiée.

Ces modèles présentent néanmoins quelques limitations dans leur usage, notamment si on souhaite ultérieurement réaliser des études paramétriques sur le moteur dans plusieurs configurations de vol. En effet, la construction de ces réseaux de réacteurs et la définition de leurs paramètres d'entrée caractéristiques tels que la température, le temps de résidence ou encore la richesse s'appuient généralement en amont sur une modélisation CFD de la chambre à étudier (cas par exemple des études de Fichet, 2008 ; Lebedev et al., 2009 ; Zakharov et al., 2009). Outre cette éventuelle problématique, les modèles énumérés plus haut représentent généralement la zone primaire à l'aide d'un ou de deux PSRs. Cette modélisation implique que la totalité du mélange air-carburant soit parfaitement mélangée et le demeure dans toute la zone (Allaire, 2006). En réalité, l'existence de gradients de température, de zones de recirculation et la nature même de la flamme de diffusion dans le cas des chambres de combustion aéronautiques, ne permettent pas un tel niveau d'homogénéisation (c.-à-d. une richesse constante dans tout le volume de la zone primaire). À cela s'ajoute une atomisation du carburant liquide par l'injecteur qui en pratique est loin d'être uniforme spatialement, comme l'illustre la Figure 1.9 issue d'une étude expérimentale sur un injecteur de chambre de combustion aéronautique.

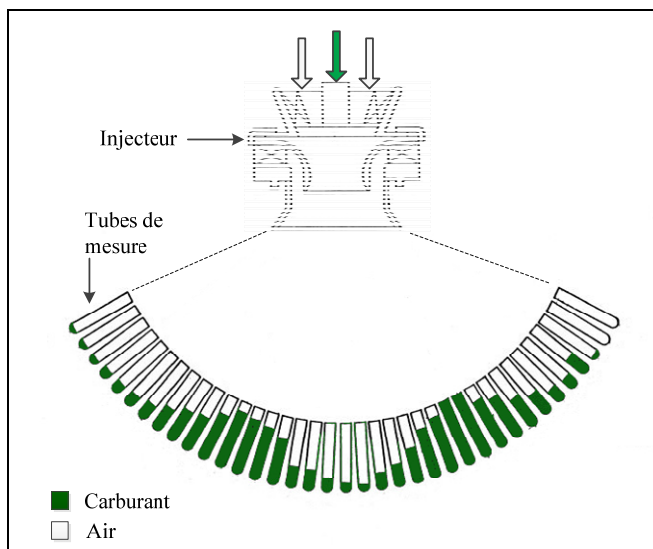


Figure 1.9 Mesure de la distribution radiale en masse du carburant en sortie d'injecteur
Adaptée de Burrus et al. (1984, p. 144)

Toutes ces sources de non-uniformité du mélange air-carburant dans la zone primaire entraînent des déviations locales de la richesse par rapport à la richesse moyenne ϕ_{ZP} . Ces déviations influent significativement sur la production de NO_x, CO et particulièrement de suies, en créant soit des zones de mélange localement riche ($\phi > 1$) favorisant la production de CO et de suies, soit en produisant des zones à très haute température (pour $\phi \sim 1$) favorables à la formation des NO_x. Il convient donc de développer une modélisation de la zone primaire par CRN qui prend en considération cette non-uniformité du mélange air-carburant si on souhaite reproduire avec exactitude les niveaux de richesse locale et par conséquent les niveaux d'émissions polluantes. Cette problématique a donné lieu à l'élaboration de modèles multiréacteurs pour la zone primaire (nombre de réacteurs $\gg 2$), dont les principaux d'entre eux sont présentés ci-après.

1.3.3 CRN avec zone primaire multiréacteurs

La modélisation multiréacteurs de la zone primaire consiste en un ensemble de n -PSRs en parallèle dans chacun desquels est allouée une fraction spécifique du mélange air-carburant à une richesse donnée. Cette modélisation suppose de définir au préalable une fonction de distribution de la richesse au sein de la zone primaire. La représentation multiréacteurs à n -PSRs en parallèle constitue ainsi une représentation discrète de cette distribution. Au sujet de la définition de la fonction de distribution de la richesse, des études expérimentales menées par Fletcher et Heywood (1971) sur la formation des NO_x dans les turbines à gaz ont montré la possibilité de la représenter au moyen d'une loi normale (ou distribution gaussienne), centrée sur de la richesse moyenne de la zone primaire (ϕ_{ZP}). Les CRNs pour chambre de combustion rencontrés dans la littérature utilisant la représentation à n -PSRs en parallèle (Allaire, 2006 ; Martini, 2008 ; Rezvani, 2010; Rizk, 2002) s'appuient généralement sur cette distribution gaussienne de la richesse. Concernant les résultats obtenus dans ces mêmes études, il en ressort une nette amélioration dans les prédictions des émissions, et ce, sur l'ensemble de la plage de fonctionnement du moteur en comparaison à des corrélations empiriques (Allaire, 2006) ou des modèles de CRN avec mélange uniforme dans la zone primaire (Rezvani, 2010). Les modèles d'Allaire (2006) et de Rezvani (2010) à titre

d'exemple parviennent à reproduire avec une bonne fidélité les tendances expérimentales observées sur les émissions de CO et NO_x avec la puissance moteur. Leur modèle offre également d'excellents résultats (avec des erreurs relatives de l'ordre du pourcent, voire moins) sur les émissions de NO_x à forte puissance et de CO à faible puissance (configuration où ces émissions sont maximales), et ceci, sur plusieurs gammes de moteurs.

Que ce soient les modèles de CRN recensés à la partie 1.2.2 (ZP mono- ou bi-PSRs) ou 1.2.3 (ZP multi-PSRs), ces derniers se sont concentrés uniquement sur le développement d'un réseau de réacteurs pour la chambre de combustion et n'ont pas pris en considération les modules postchambre (turbine et tuyère). Ces modèles ont généralement considéré que les niveaux d'émissions en sortie de moteur étaient quasi identiques à ceux en sortie de chambre. Cette hypothèse est assez bien vérifiée lorsqu'il s'agit d'étudier uniquement les émissions de CO ou de NO_x. En revanche si on souhaite étudier des espèces plus minoritaires telles que les SO_x, les précurseurs d'aérosols (H₂O, H₂SO₄, HNO₃) ou encore les particules de suie, il apparaît que l'omission des modules postchambre conduit à des erreurs certaines, ce que tendent à mettre en évidence les études suivantes.

1.3.4 Modèles 0D/1D avec postcombustion

Cette rubrique vise à mentionner quelques travaux d'intérêt en lien avec la modélisation 0D/1D des émissions polluantes dans une turbine à gaz. Il est à noter que contrairement aux deux rubriques précédentes, ces études n'ont pas utilisé de réseau de réacteurs chimiques (avec PSR/PFR) pour modéliser l'écoulement réactif dans la chambre de combustion et les modules postchambre. Un résumé des spécificités de chacune d'elles est présenté ci-après.

- Starik et al. (2002) et Lukachko et al. (1998), (2008) : Ces 3 études se sont intéressées à l'évolution des produits de combustion majeurs en sortie de moteur (CO_x, NO_x) et plus spécifiquement les précurseurs d'aérosols sulfatés (SO_x, H₂SO₄) au travers des étages turbines et tuyère. Les particules de suie n'ont cependant pas été étudiées. Le profil d'évolution de la pression, la température et de la vitesse des gaz brûlés est supposé

unidimensionnel dans les étages turbine et tuyère (un modèle 2D a également été analysé dans les travaux de Lukachko et al., 1998 et 2008) et tiennent compte de la présence des aubes dans les étages turbines. Les calculs de chimie dans ces modules postchambre ont été initialisés en supposant des concentrations en entrée de module ou en modélisant la chambre de combustion au moyen d'un unique réacteur chimique. Il ressort des analyses faites le long de ces modules que l'oxydation des SO_x se maintient après la chambre de combustion et contribue sensiblement à la formation des précurseurs d'aérosols. À titre d'exemple, l'étude menée par Starik et al. (2002) (de même que celle de Moniruzzaman et Yu (2012) présentée ci-après) montre une variation de la concentration en H_2SO_4 au travers des modules postchambre de l'ordre d'un facteur 1000. Ces observations suggèrent une influence possible de ces modules sur les particules de suie qui devrait faire l'objet d'une analyse.

- Moniruzzaman et Yu (2012) :

Ce modèle 0D pour chambre de combustion de turbine à gaz avec intégration d'une partie postchambre constitue à l'heure actuelle un des modèles les plus complets pour la prédiction des polluants majeurs aéronautiques (CO_x , NO_x , SO_x , UHC et particules de suie). De plus, celui-ci utilise une cinétique chimique détaillée pour modéliser la combustion du kérosène (contrairement à la majorité de tous les modèles présentés plus hauts), intègre la formation des précurseurs de suies (PAHs) puis des particules et emploie un modèle dynamique par section pour évaluer les propriétés (nombre, masse, diamètres) de la population de particules de suie produites. Le modèle de combustion se compose de trois zones pour la chambre de combustion, chacune étant découpée en plusieurs parcelles permettant de modéliser la non-uniformité des concentrations en espèce et comporte une zone turbines-tuyère dans laquelle les gaz sont détendus linéairement jusqu'à la pression atmosphérique externe. Les calculs de chimie dans les parcelles sont réalisés au moyen de réacteurs chimiques 0D fermés (« closed batch reactors ») dans lesquels un temps de résidence des gaz est supposé selon des considérations des auteurs. Ce modèle 0D a été appliqué au régime de ralenti (Idle) du moteur CFM56-2C1 employé dans la campagne expérimentale sur les émissions de

particules APEX-1 (Wey et al., 2006). Comme résultats significatifs, le modèle de Moniruzzaman et Yu (2012) parvient à estimer avec une assez bonne précision l'ordre de grandeur des émissions massiques de suies, le nombre de particules et de leur plage de dimensions en sortie du moteur pour la seule configuration ralenti étudiée. Leur étude a également mis en évidence une influence des modules postchambre sur la population de particules de suie, bien que celle-ci soit plus modérée (variation des indices d'émissions en masse et en nombre de particules au travers des modules postchambre en deçà d'un facteur 2).

1.3.5 Bilan

La revue de littérature menée sur les modèles 0D/1D existants pour chambre de combustion et modules postchambre de turbine à gaz (par CRN ou autres) a mis en évidence certaines problématiques qui devront être considérées ultérieurement:

- Prise en compte de la non-uniformité du mélange air-carburant dans la zone primaire. Seuls les modèles multiréacteurs de (Allaire, 2006 ; Martini, 2008 ; Rezvani, 2010 ; Rizk, 2002) et celui par parcelles de (Moniruzzaman et Yu, 2012) prennent en considération cet aspect. Ne pas tenir compte de cette non-uniformité a des répercussions sur les calculs des émissions polluantes et tout particulièrement ceux associés aux particules de suie.
- Paramétrage des réacteurs chimiques.
Un certain nombre de modèles qui ont été présentés s'appuie sur des études expérimentales ou CFD en amont pour modéliser la chambre de combustion étudiée. L'objectif de cette pré-étude CFD est de définir les températures, richesses ou temps de résidence des gaz dans les réacteurs chimiques. Cette approche de construction et de calibration des CRNs apparait peu flexible si on souhaite mener des études paramétriques avec le modèle.

- Modélisation des modules postchambre.

L'ensemble des modèles de CRN présentés aux parties 1.2.2 et 1.2.3 n'ont pas modélisé les évolutions des produits de combustion au sein des modules turbines et tuyère. Cependant, les études de Starik et al. (2002), Lukachko et al. (1998), (2008) et Moniruzzaman et Yu (2012) dans lesquels ces modules ont été intégrés ont mis en évidence une influence de ces régions du moteur sur les concentrations en précurseurs d'aérosols et possiblement sur les particules de suie.

- Modélisation de la formation des particules de suie.

Excepté les études de Martini (2008), Shakariyants (2008) et Moniruzzaman et Yu (2012), les autres modèles énumérés dans les parties précédentes n'ont pas considéré la problématique des émissions de suies et seul le modèle de Moniruzzaman et Yu (2012) propose un couplage entre une cinétique détaillée de combustion du kérosène et un modèle complet de formation des particules de suie. Or l'omission des espèces aromatiques initialement présentes dans le kérosène ou l'utilisation d'un plus petit hydrocarbure en substitution du kérosène (cas de Martini (2008)) tend à sous-estimer les émissions de suies.

1.4 Objectifs du mémoire

La revue de littérature a mis en évidence la complexité du mécanisme physico-chimique associé à la formation des particules de suie et de leurs précurseurs. Cette complexité est d'autant plus accrue lorsqu'il s'agit de coupler ce mécanisme à celui de combustion du carburant, surtout lorsque celui-ci est constitué d'un mélange de plusieurs dizaines d'hydrocarbures comme le kérosène. Pourtant, ce couplage entre le mécanisme de formation des suies et la composition du carburant s'avère nécessaire et ne peut être simplifié, notamment si on souhaite apprécier l'impact de chacun des composés du carburant sur la formation des suies et obtenir en sortie de moteur des concentrations qui soient physiquement réalistes. Sous cette exigence, l'utilisation de cet ensemble de mécanismes au travers de plusieurs études paramétriques dans un modèle de combustion pour une turbine à gaz paraît à l'heure actuelle impensable avec les techniques classiques de CFD.

Les modèles numériques 0D/1D, notamment par réseau de réacteurs chimiques, apparaissent comme une solution intéressante pour envisager des études aussi complexes. Toutefois une attention particulière doit être accordée à leur méthodologie de construction et de calibration, si on souhaite obtenir des résultats en matière d'émissions polluantes qui soient sensibles aux phénomènes physiques observés dans les moteurs.

Pour répondre à ces problématiques, voici les trois objectifs de recherche établis dans ce mémoire:

- 1) Développer un modèle 0D/1D de combustion dans une turbine à gaz qui tient compte des évolutions des émissions polluantes depuis la chambre de combustion jusqu'à la sortie du moteur, et ce, pour différentes configurations de fonctionnement d'un moteur réel.
- 2) Définir un mécanisme complet pour la formation et la croissance des particules de suie. Celui-ci devra pouvoir être couplé avec une cinétique chimique de combustion du kérosène et permettre d'estimer les propriétés principales d'une population de particules de suie.
- 3) Évaluer la qualité des prédictions obtenues sur les émissions de particules de suie en sortie de moteur (concentration, masse moyenne, diamètre moyen) avec le modèle de réseau de réacteurs développé en 1) et le mécanisme pour particules de suie défini en 2).

CHAPITRE 2

MODÈLE DE COMBUSTION ET DE POSTCOMBUSTION DANS LES TURBINES À GAZ AÉRONAUTIQUES PAR RÉSEAU DE RÉACTEURS CHIMIQUES

2.1 Théorie sur les modèles de réacteurs chimiques PSR et PFR

Les calculs de concentrations en espèces chimiques et des grandeurs thermodynamiques de l'écoulement (température, vitesse, pression) au sein du CRN développé dans ce chapitre ont été réalisés au moyen de la routine AURORA du logiciel de calcul de cinétique chimique CHEMKIN/CHEMKIN-PRO® (Reaction-Design, 2013c). Ce logiciel intègre plusieurs modèles de réacteurs chimiques 0D ou 1D, dont notamment ceux du PSR (« Perfectly Stirred Reactor », réacteur 0D) et du PFR (« Plug Flow Reactor », réacteur 1D) qui seront employés pour la construction du CRN. Avant de présenter en détail la structure du CRN proposé, un point théorique sur les équations qui régissent les réacteurs PSR et PFR sous le logiciel CHEMKIN/CHEMKIN-PRO® doit être apporté.

2.1.1 Réacteur 0D : le PSR (Perfectly Stirred Reactor)

Le PSR est un réacteur chimique non dimensionnel dans lequel un mélange parfait des espèces chimiques est supposé être réalisé dans le volume de contrôle qui est défini sur la Figure 2.1 (Turns, 2000). Sur cette même figure sont également introduits les paramètres d'entrée-sortie et internes au PSR employées ultérieurement dans les équations (2.2) et (2.3) régissant ce modèle.

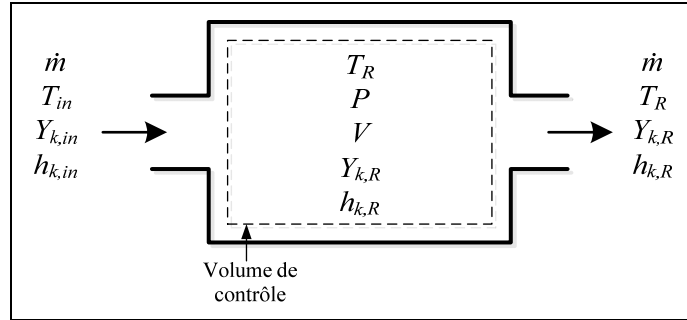


Figure 2.1 Schéma du PSR et paramètres associés
Adaptée de Turns (2000, p.189)

Cette hypothèse de mélange parfait qui implique un Da nul fait que le modèle de PSR dépend uniquement de la cinétique des réactions chimiques qui s'y produisent. Aussi, la supposition d'avoir un mélange parfait instantané entre réactifs et produits (avec l'hypothèse de régime stationnaire) implique que la concentration massique Y_k de l'espèce k à la sortie du réacteur est identique à celle au sein du volume de contrôle (Glassman et Yetter, 2008). Il en va de même pour la température de sortie.

Le paramètre prédominant dans le modèle de PSR est le temps de résidence t_{res} dont disposent les espèces chimiques pour réagir entre elles au sein du volume de contrôle. Celui se définit par (adaptée de Turns, 2000, p. 191)

$$t_{res} = \frac{m}{\dot{m}} = \frac{\rho_{mel} V}{\dot{m}}, \quad (2.1)$$

avec

m : la masse de mélange dans le volume de contrôle en [kg],

\dot{m} : le débit massique de gaz au travers du PSR, en [kg/s],

ρ_{mel} : la masse volumique du mélange dans le volume de contrôle (aussi égale à la masse volumique en sortie du PSR), en [kg/m³],

V : le volume de contrôle du PSR, en [m³].

Pour ce qui est de l'aspect mathématique associé au modèle de PSR, celui-ci est régi par les deux équations de conservation suivantes (en régime permanent, Turns, 2000, p. 191) :

- Conservation de la masse

$$\dot{\omega}_k MW_k V + \dot{m}(Y_{k,in} - Y_{k,R}) = 0, \text{ pour } k=1 \dots N \text{ espèces,} \quad (2.2)$$

avec

$\dot{\omega}_k$: le taux de production net de la $k^{\text{ème}}$ espèce dans le PSR, en $[\text{mol}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})]$,

MW_k : la masse molaire de la $k^{\text{ème}}$ espèce, en $[\text{kg}/\text{mol}]$,

$Y_{k,in}$, $Y_{k,R}$: la fraction massique en espèce k respectivement à l'entrée du PSR et à la sortie (cette dernière est égale à la fraction massique au sein du réacteur).

- Conservation de l'énergie (en supposant le réacteur adiabatique)

$$\dot{Q} = \dot{m}(h_R - h_{in}) = \dot{m} \left(\sum_{k=1}^N Y_{k,R} h_k(T_R) - \sum_{k=1}^N Y_{k,in} h_k(T_{in}) \right), \quad (2.3)$$

avec

\dot{Q} : le taux de chaleur libéré par l'ensemble des réactions, en $[\text{J}/\text{s}]$,

$h_k(T_{in}), h_k(T_R)$: l'enthalpie massique de l'espèce k respectivement à l'entrée et à la sortie du PSR, en $[\text{J}/\text{kg}]$.

T_{in} , T_R : la température des réactifs à l'entrée du réacteur, des gaz brûlés à la sortie du réacteur (égale aussi à la température au sein du réacteur), en $[\text{K}]$.

On obtient dès lors $N+1$ équations non linéaires couplées en température et en concentration massique Y_k . Le calcul de la température et des concentrations en sortie est similaire au calcul de la température de flamme adiabatique. La seule nuance est que désormais la composition des produits est déterminée par les cinétiques chimiques et non la composition à l'équilibre (Kirk, 2012).

2.1.2 Réacteur 1D : le PFR (Plug Flow Reactor)

Le PFR, dont une schématisation est donnée à la Figure 2.2 avec les variables associées, est un réacteur chimique idéal dont les propriétés du mélange (chimiques et thermodynamiques) évoluent dans la direction axiale de l'écoulement.

Le modèle du PFR inclut également certaines suppositions énumérées ci-après (adaptées de Kirk (2012)).

- 1) Régime permanent
- 2) Pas de mélange dans la direction axiale. Ceci implique que les phénomènes de diffusion de masse moléculaire et/ou turbulente sont négligeables dans la direction de l'écoulement.
- 3) Les propriétés du mélange sont uniformes dans la direction perpendiculaire à l'écoulement.
- 4) L'écoulement est sans frottement (aspect visqueux du fluide négligé). Il est donc possible de relier la pression et la vitesse par l'équation d'Euler.
- 5) Hypothèse de gaz parfait.

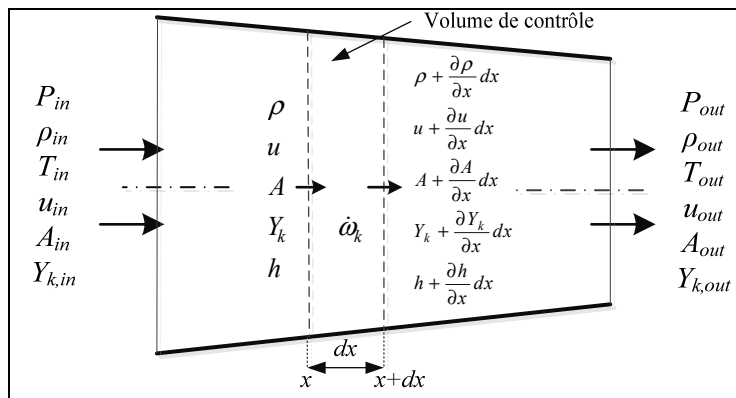


Figure 2.2 Schéma du PFR et paramètres associés

Les équations de conservation appliquées au PFR sur un volume de contrôle de largeur dx et de section $A(x)$ (illustré sur la Figure 2.2) sont quant à elles définies par (Turns, 2000, p. 201 et 203) :

- Conservation de la masse

$$\frac{d(\rho u A)}{dx} = 0, \quad (2.4)$$

- Conservation de la quantité de mouvement (selon x, direction axiale)

$$\rho u \frac{du}{dx} + \frac{dP}{dx} = 0, \quad (2.5)$$

avec

u , P et ρ : la vitesse selon x, pression et masse volumique du mélange en un point x donné, respectivement, en [m/s], [Pa], [kg/m³].

- Conservation des espèces

$$\frac{dY_k}{dx} - \frac{\dot{\omega}_k MW_k}{\rho u} = 0. \quad (2.6)$$

avec

$\dot{\omega}_k$: le taux de production net de la k^{ème}, en [mol/(m³.s)],

Y_k : la fraction massique en espèce k.

- Conservation de l'énergie

$$\frac{d(h + \frac{u^2}{2})}{dx} + \frac{\dot{Q}'' P}{\dot{m}} = 0. \quad (2.7)$$

avec

h : l'enthalpie massique du mélange, en [J/kg],

\dot{Q}'' : le flux de chaleur échangé avec l'extérieur par unité de surface, en [W/m²],

P : le périmètre local du réacteur, en [m],

\dot{m} : le débit massique de gaz au travers du PFR, en [kg/s].

Dans le cas de la modélisation d'une chambre de combustion, il est d'usage de supposer que celle-ci est adiabatique. Ceci a pour conséquence d'annuler le flux de chaleur \dot{Q}'' dans

l'équation (2.7). Après simplifications via l'emploi de l'équation d'état des gaz parfaits ($P = \rho RT / MW_{mel}$, où R est la constante universelle des gaz parfaits et MW_{mel} la masse molaire du mélange au sein de volume de contrôle), ces équations de conservation peuvent se ramener à un système de trois équations différentielles ordinaires du premier ordre donnant l'évolution de la température, de la masse volumique et de la fraction massique de chaque espèce au sein du PFR (cf. Turns, 2000, pour le détail de ces 3 expressions).

Le temps de résidence t_{res} au travers du PFR s'obtient quant à lui par la relation (2.8)

$$t_{res} = \sum_{i=1}^N t_i = \sum_{i=1}^N \frac{\Delta x_i}{u_i}, \quad (2.8)$$

avec

t_i : le temps de transit dans une cellule ; Δx_i : la largeur de la cellule i ;

u_i : la vitesse du fluide dans la cellule i et N est le nombre de cellule dans le PFR.

2.2 Conception du CRN pour turbines à gaz aéronautiques

Cette étape de construction du CRN pour turbines à gaz aéronautiques vise à définir les choix de modélisation retenus pour la chambre de combustion, les modules postchambre (turbines et tuyère) et les hypothèses qui sont associées.

2.2.1 CRN pour la chambre de combustion

Le réseau de réacteurs chimiques présenté dans cette rubrique permet de reproduire la formation et l'évolution des produits de combustion au sein de la chambre de combustion. Celui-ci s'appuie essentiellement sur les travaux de Rizk et Mongia (2002), Allaire (2006) et Rezvani (2010). Ces trois modèles de réseau de réacteurs ont comme point commun d'être structurés selon un découpage de la chambre en trois zones caractéristiques que sont les zones primaire, secondaire et de dilution. Dans ces études, une attention spécifique a été portée à la distribution du mélange air-carburant dans la zone primaire. Les rubriques suivantes explicitent le choix de modélisation retenu pour chacune de ces zones.

Zone primaire (ZP)

Les modèles de Rizk et Mongia (2002), Allaire (2006) et Rezvani (2010) emploient une représentation multiréacteurs de la zone primaire à l'aide de n PSRs mis en parallèle, tel qu'illustré par la Figure 2.5 représentant la configuration de la chambre de combustion à l'aide de PSRs et de PFRs et les principales données d'entrée du modèle.

Une telle modélisation a également été retenue dans ce mémoire. Sur la base des observations expérimentales de Fletcher et Heywood (1971), une loi de distribution normale de la richesse φ centrée sur la richesse moyenne de la zone primaire φ_{ZP} a été employée pour le calcul de la fraction de mélange à allouer à chacun des n PSRs. Pour une telle distribution, la fraction de mélange admis dans le PSR ayant une richesse comprise entre φ et $\varphi+d\varphi$ est donnée par $f(\varphi).d(\varphi)$, avec (tirée de Pompei et Heywood, 1972, p. 409)

$$f(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(\varphi-\varphi_{ZP})^2}{2\sigma^2}}, \quad (2.9)$$

où

φ_{ZP} : la richesse moyenne de la zone primaire,

σ : l'écart type de la loi normale.

Sur la base de la richesse moyenne et de l'écart type de cette distribution, il est d'usage de définir également le paramètre de mélange « S » dont l'expression est donnée par

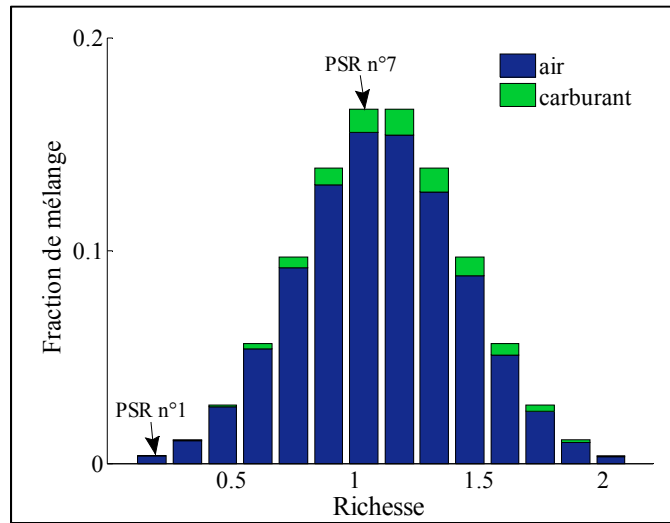
$$S = \frac{\sigma}{\bar{\varphi}} \quad (2.10)$$

Ce paramètre S peut être interprété comme une mesure de la non-uniformité du mélange air-carburant dans la zone primaire, avec le cas $S = 0$ (c.-à-d. un écart type de la distribution nul) correspondant à une configuration de mélange parfait (Pompei et Heywood, 1972).

La modélisation multiréacteurs à n -PSRs mis en parallèle définit ainsi une discrétisation de cette distribution normale sur une plage de richesse donnée. Une représentation de cette discrétisation est donnée à la Figure 2.3 pour un couple de valeurs $(\varphi_{ZP} ; S)$ fixé.

La méthodologie complète de calcul de la fraction mélange air-carburant à allouer à chaque PSR en fonction du nombre de PSRs « n », de la richesse moyenne φ_{ZP} et du paramètre de mélange S est présentée en ANNEXE I.

Il est à noter qu'en théorie la loi normale est une distribution définie sur un domaine allant de $-\infty$ à $+\infty$. L'utilisation de la richesse comme variable d'abscisse impose donc une troncature de la distribution pour les valeurs négatives de cette variable (une richesse négative n'a pas de sens physique en soi). Cette troncature devra s'accompagner par la suite d'une renormalisation de la distribution (Rezvani, 2010), explicitée également en ANNEXE I.

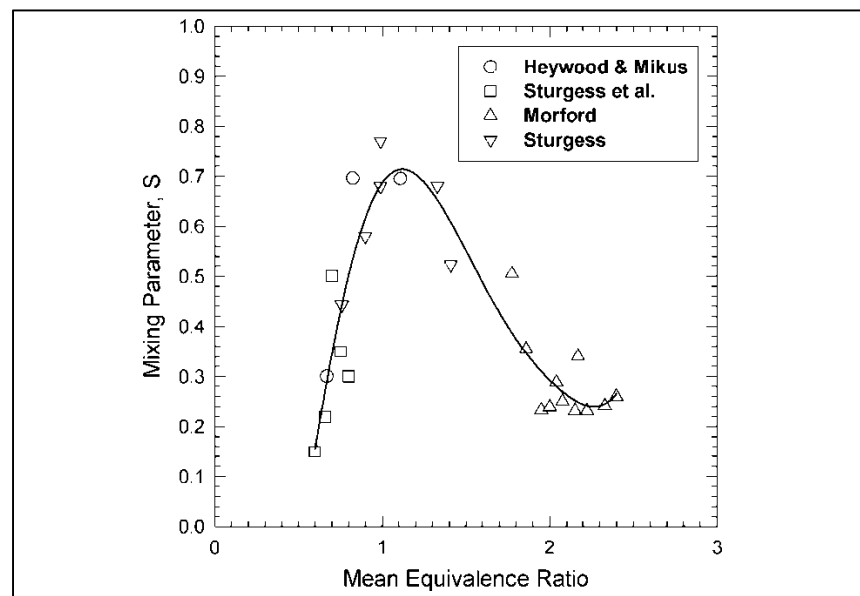


Configuration de la zone primaire : $\varphi_{ZP} = 1.1$; $S = 0.3$

Figure 2.3 Distribution du mélange air-carburant dans les PSRs de la zone primaire

L'estimation de la richesse moyenne φ_{ZP} pour caractériser la distribution normale n'est pas une donnée problématique en soi. Elle peut être obtenue en supposant une répartition de l'air provenant du compresseur dans les différentes zones de la chambre. Cette répartition peut être basée soit sur des modèles semblables de chambre, soit sur des données expérimentales. φ_{ZP} peut être aussi considérée comme une variable à définir en phase de conception.

Pour ce qui est de l'écart type σ et plus généralement du paramètre de mélange S , son évaluation n'est pas immédiate. Expérimentalement, l'estimation du paramètre de mélange S est délicate, car elle découle directement d'une mesure de la distribution de la richesse au sein de la zone primaire. Même si une analyse des concentrations locale en O_2 permettrait d'obtenir une représentation directe de la non-homogénéité (Flagan et Seinfeld, 1988 ; Pompei et Heywood, 1972), sa mise en place s'avère en pratique complexe. D'autres études (Sturgess, McKinney et Morford, 1993 ; Sturgess et al., 2005) ont souligné une relation possible entre la valeur du paramètre S et celle de la richesse moyenne ϕ_{ZP} dans la zone primaire. Une illustration de cette corrélation entre S et ϕ_{ZP} est donnée à la Figure 2.4 où sont regroupées plusieurs valeurs du paramètre S pour diverses chambres de combustion aéronautiques.



Mean Equivalence Ratio = richesse moyenne ϕ_{ZP}

Figure 2.4 Valeurs expérimentales du paramètre de mélange S collectées sur des chambres de combustion aéronautiques
Tirée de Sturgess et al. (2005, p. 204)

Il est à noter cependant que cette corrélation S - ϕ_{ZP} proposée par Sturgess et al. (2005) ne peut pas être considérée comme universelle pour autant. D'une part, les valeurs et l'étendue de cette courbe S - ϕ_{ZP} peuvent différer sensiblement entre deux modèles de chambre de

combustion (Rezvani, 2010). D'autre part, ceci reviendrait à négliger l'influence possible de la géométrie spécifique de chaque chambre de combustion (Allaire, 2006), ou encore du système d'injection de carburant (Rezvani, 2010) sur le paramètre de mélange S . Pour faire face à cette problématique, des méthodes indirectes de calibration du paramètre S ont été développées (Allaire, 2006 ; Martini, 2008 ; Rezvani, 2010). Elles reposent sur l'étalonnage de ce paramètre à l'aide des émissions polluantes qui sont caractéristiques de la combustion au sein de la chambre telles que le CO et les NO_x. Sur la base d'une estimation des seuils d'émissions de ces deux polluants en sortie du moteur, en s'appuyant par exemple sur les données d'une chambre de combustion antérieure et semblable, il est possible par calibration de définir une valeur du paramètre de mélange S qui permet de reproduire au mieux avec le CRN les niveaux d'émissions obtenus dans une configuration moteur donnée. Une méthodologie similaire sera employée et présentée au chapitre 4.

Zone secondaire (ZS)

Le choix de modélisation retenu pour cette zone correspond à celui fait par Allaire (2006). Il s'agit de représenter la zone secondaire par un unique PFR (propriétés du fluide homogène radialement, mais variable suivant x), en soulignant que la composition du mélange des gaz ne peut être considéré comme parfaitement homogène dans tout le volume de cette zone et que le premier apport d'air de dilution confère à l'écoulement une évolution essentiellement axiale. Ce modèle suppose que le mélange avec les gaz brûlés issus de la zone primaire et le premier apport d'air de dilution soit réalisé quasi instantanément et nécessite la mise en place d'un mélangeur inerte en amont de la zone secondaire (c.-à-d. en amont du PFR_ZS sur la Figure 2.5). L'air de refroidissement pariétal de la zone primaire est également injecté dans ce mélangeur inerte.

Zone de dilution (ZD)

L'ensemble des études menées sur la modélisation d'une chambre de combustion par CRN (Allaire, 2006 ; Rezvani, 2010 ; Rizk, 2002 ; Swithenbank et al., 1973) s'accorde à considérer la zone de dilution finale comme un PFR ; la dynamique du fluide étant globalement unidimensionnelle dans cette région. De manière identique au modèle de la zone

secondaire, les gaz brûlés en amont de cette zone sont mélangés au deuxième apport d'air de dilution dans un mélangeur inerte avant d'être introduits dans le PFR (PFR_ZD sur la Figure 2.5). L'air de refroidissement pariétal de la zone secondaire est supposé être mélangé à l'écoulement global à ce même niveau. Pour ce qui est de l'air de refroidissement de la zone de dilution, son mélange avec les gaz brûlés est réalisé en fin de chambre de combustion dans un mélangeur inerte.

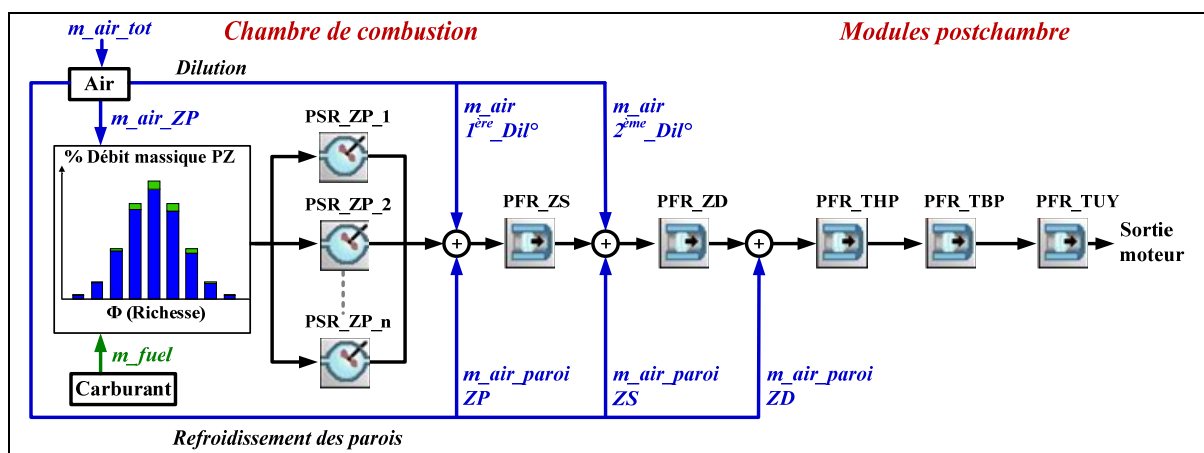


Figure 2.5 CRN complet pour turbines à gaz aéronautiques

2.2.2 CRN pour les modules postchambre (turbines et tuyère)

Pour simuler l'évolution des produits de combustion en aval de la chambre, un réseau de réacteurs chimiques composé de trois PFRs, respectivement associés au module de turbine haute pression (THP), basse pression (TBP) et à la tuyère (TUY) a été développé. Une représentation de ce CRN et sa jonction avec celui de la chambre de combustion sont données à la Figure 2.5. La première hypothèse de ce modèle est de considérer l'écoulement dans ces modules comme étant unidimensionnel (évolution des propriétés thermodynamiques suivant la direction axiale). La deuxième est de négliger dans une première approximation l'influence des différents étages turbines et de leurs composants (stator et rotor) sur la thermodynamique de l'écoulement. Seules les propriétés entre l'entrée et la sortie du module complet sont ici considérées.

2.2.3 Hypothèses relatives au paramétrage du CRN

Quelques remarques et hypothèses doivent être apportées au sujet de certains paramètres d'entrée ou de sortie associés aux réacteurs chimiques du CRN.

Chambre de combustion

- 1) En suivant une hypothèse similaire à celle employée par Rezvani (2010) et Martini (2008), il a été décidé de distribuer le volume total de la zone primaire proportionnellement à la fraction de mélange attribuée à chaque PSR de cette zone.

Les températures atteintes dans les PSRs et celles en fin de PFRs ne sont pas initialement connues. Elles s'obtiennent par résolution de l'équation d'énergie (2.3) pour le PSR et (2.7) pour le PFR. Dans le cas du PSR, une estimation de la température finale T_{cvge} est donnée pour aider à la convergence des calculs. Celle-ci correspond à la température d'équilibre adiabatique atteinte par le mélange à la richesse ϕ_k imposée dans le $k^{ème}$ PSR.

- 2) Connaissant le débit d'air total alloué au refroidissement des parois de la chambre ($m_{air_paroi_tot}$), on fera l'hypothèse que celui-ci est distribué pour chacune des zones proportionnellement à leur surface pariétale (le flux thermique évacué est proportionnel à cette surface), ce qui revient dans l'approximation d'une chambre de combustion cylindrique à être également proportionnel au volume respectif de ces zones.

$$m_{air_paroi_ (ZP ; ZS ; ZD)} = m_{air_paroi_tot} \frac{V_{(ZP ; ZS ; ZD)}}{V_{tot_chambre}}, \quad (2.11)$$

avec

$m_{air_paroi_ (ZP ; ZS ; ZD)}$: le débit d'air alloué au refroidissement des parois de la zone ZP, ZS et ZD respectivement, en [kg/s],

$V_{(ZP ; ZS ; ZD)}$: le volume de la zone ZP, ZS et ZD respectivement, en [cm³],

$V_{tot_chambre}$: le volume total de la chambre de combustion, en [cm³].

- 3) Par souci de simplicité, on négligera l'échauffement progressif de l'air le long des parois et sa température sera maintenue égale à la température en entrée de chambre ($T_{0,3}$).

$$T_{air} = constante = T_{0,3}. \quad (2.12)$$

- 4) La pression sera supposée constante dans l'ensemble de la chambre et égale à celle en entrée de la chambre ($P_{0,3}$).

$$P = \text{constante} = P_{0,3} . \quad (2.13)$$

- 5) Puisque le nombre de Mach est inconnu dans chaque zone, il a été décidé de réaliser le paramétrage en température totale (T_0) et pression totale (P_0).

Modules postchambre

- 1) On supposera que la pression totale $P_{0,4}$ en entrée de turbine haute pression (THP) est égale à la pression dans la chambre, soit

$$P_{0,4} = P_{0,3} . \quad (2.14)$$

- 2) Les pressions $P_{0,45}$ et $P_{0,5}$ en sortie de turbines THP et TBP respectivement pourront quant à elles être obtenues à partir de la donnée des ratios de détente dans les modules turbines haute pression (THP) et basse pression (TBP), définis par

$$\Pi_{THP} = \frac{P_{0,45}}{P_{0,4}} ; \Pi_{TBP} = \frac{P_{0,5}}{P_{0,45}} . \quad (2.15)$$

La liste des paramètres initiaux à définir pour les PSRs et PFRs des CRNs de la chambre de combustion et des modules postchambre sont recensés en ANNEXE II.

2.3 Détails sur l'initialisation et l'exécution des calculs dans le CRN

Afin d'automatiser les calculs dans les études paramétriques menées aux chapitres 4 et 5, un programme MATLAB® (MathWorks, 2012) permettant d'initialiser les paramètres d'entrée-sortie des réacteurs du CRN (PSRs, PFRs, et mélangeurs inertes) et de lancer l'exécution des calculs de cinétique chimique au sein de ces mêmes réacteurs a été développé. Sa structure et une description brève des spécifications associées à ses sous-programmes sont présentées sur l'organigramme Figure 2.6 (programme MATLAB nommé RUN_CRN.m). Les étapes d'exécution de ce programme sont les suivantes :

- 1) Dans un fichier de configuration (Configuration.m) sont renseignés le nombre de PSRs pour la zone primaire, les paramètres thermodynamiques, les débits d'air au sein de la chambre pour les différentes configurations de vol étudiées et les données géométriques associées au moteur. Ces paramètres définiront les conditions d'entrée-sortie pour les PSRs et PFRs.
- 2) Le calcul des débits d'air et de carburant à allouer à chaque PSR de la zone primaire selon la méthode présentée en ANNEXE I est réalisé dans un second temps (Repartition_debits.m).

Il s'en suit l'exécution chronologique des calculs de cinétique chimique au sein des PSRs de la zone primaire (RUN_ZP.m), dans les PFRs de la zone secondaire et de dilution (RUN_ZS-ZD.m) puis dans ceux des modules postchambre (RUN_POST-CC.m). Ces calculs sont réalisés par l'appel de la routine AURORA.exe de CHEMKIN/CHEMKIN-PRO® (Reaction-Design, 2013c) depuis le programme MATLAB. Cette routine requiert au préalable la présence du fichier gas.asc (et surf.asc respectivement si un calcul d'émissions de suies est désiré) compilé via le préprocesseur du logiciel CHEMKIN. Ce fichier compilé comprend les données thermodynamiques des espèces chimiques employées et les réactions constitutives du mécanisme de combustion du carburant (respectivement de formation des suies). Il est à préciser également que tous calculs avec modélisation de la formation des particules de suie nécessitent de posséder une licence CHEMKIN-PRO.

- 3) L'exécution des calculs avec AURORA.exe terminée, des fichiers .out comprenant les données thermodynamiques et les concentrations des différentes des espèces chimiques au sein des réacteurs sont générés.

Au sujet de la résolution des équations algébriques non linéaires associées au modèle de PSR en régime permanent, la routine AURORA.exe de CHEMKIN utilise le solveur TWOPNT constitué d'une procédure hybride Newton-Raphson (c.-à-d. itératif)/intégration temporelle. Cette procédure hybride permet dans le cas où l'algorithme de Newton-Raphson ne converge pas au cours de l'itération de fournir une nouvelle estimation de départ de la solution pour ce même algorithme en réalisant l'intégration temporelle des équations de conservation du PSR dans leur version non permanente (Reaction-Design, 2013c). La résolution du système d'équations différentielles ordinaires du premier ordre associées au modèle de PFR est quant à elle beaucoup plus simple et est réalisée au moyen du solveur avec procédure d'intégration implicite DDASPK.

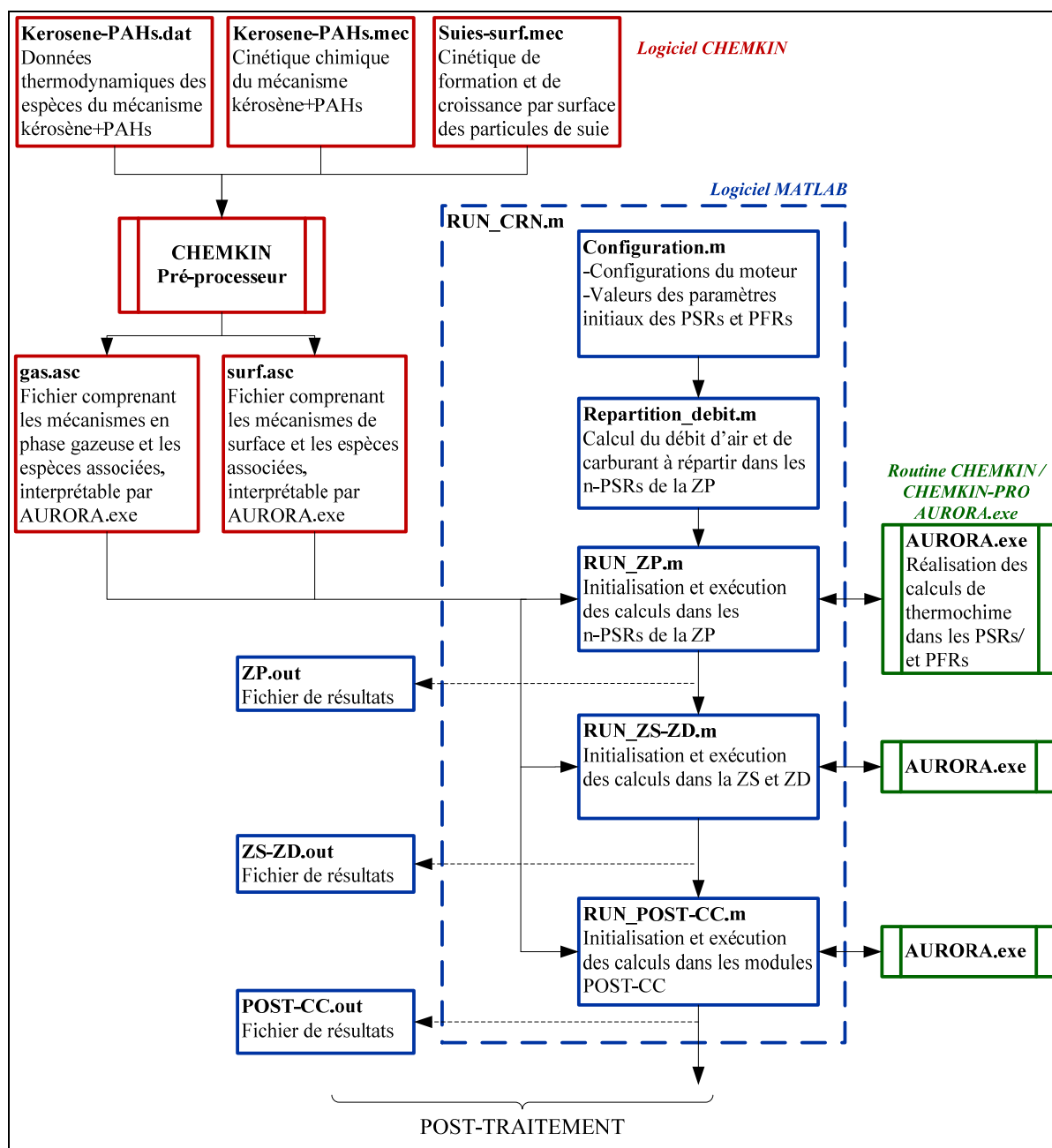


Figure 2.6 Algorithme d'exécution des calculs dans le CRN et sous-programmes associés

Le chapitre suivant traite des cinétiques chimiques qui ont été couplées aux réacteurs du CRN pour la modélisation de la combustion du kérosène et la formation des suies.

CHAPITRE 3

MÉCANISMES DE COMBUSTION DU KÉROSÈNE ET DE FORMATION DES PARTICULES DE SUIE

3.1 Préambule

Pour modéliser la combustion du carburant (kérosène) au sein des réacteurs CRN et la formation des particules de suie qui en découle, un ensemble de cinétiques chimiques définies ci-dessous doivent y être associées.

- Une cinétique en phase gazeuse qui reproduit les réactions de combustion du carburant puis celles de formation des précurseurs de suies (PAHs).
- Une cinétique qui modélise la nucléation des particules depuis les molécules précurseurs en phase gazeuse ainsi que les réactions hétérogènes (solide-gaz) en surface des particules contribuant à leur croissance individuelle.

À cela s'ajoute aussi la nécessité de définir un modèle dynamique de croissance des particules par coagulation.

Ces cinétiques et ce modèle dynamique sont présentés en détail dans les rubriques suivantes.

3.2 Mécanisme de combustion du kérosène et de formation des précurseurs de suie

Le mécanisme réactionnel de combustion d'un carburant simule l'oxydation des hydrocarbures qui le constituent et décompose ces mêmes molécules en fractions plus légères. De ces fractions légères vont découler tout un ensemble de réactions intermédiaires avec des espèces hautement réactives appelées radicaux, qui conduiront au final à l'obtention des produits de combustion tels que H_2O , CO_2 ainsi que les émissions polluantes (CO , NO_x , particules, etc.). Dans le cas particulier des carburants aéronautiques tels que le kérosène (Jet A/A-1), il est difficile de reproduire cette succession de réactions depuis la décomposition du carburant jusqu'aux produits de combustion. Ceci tient au fait que ces carburants ne sont pas

des corps purs, mais un mélange constitué de près de 200 espèces d'hydrocarbures et autres composés (Wey et al., 2006).

Toutefois, ces espèces constitutives du kérosène peuvent être regroupées selon des classes d'hydrocarbures qui présentent des propriétés chimiques et physiques assez semblables. Ainsi, le kérosène peut être défini de manière générale comme un mélange composé de 50 à 65 % en moles de paraffines (ou n-alcanes, de formule générale C_nH_{2n+2}), 10 à 20 % de naphthènes (ou n-cycloalkanes, de formule générale C_nH_{2n}), 20 à 30 % d'aromatiques (hydrocarbures constitués d'un ou plusieurs anneaux de benzène) et contient environ 500 ppm de soufre (Dagaut et Gaïl, 2007 ; Lefebvre et Ballal, 2010). De cette façon, il est possible de construire un mécanisme réactionnel simplifié de substitution du carburant à l'aide de trois espèces correctement choisies parmi ces catégories d'hydrocarbures. On parvient alors à reproduire avec suffisamment de précision la combustion du carburant et ses propriétés thermodynamiques (température de flamme adiabatique) et cinétiques (temps avant inflammation).

La composition du kérosène de substitution retenue dans ce mémoire est celle proposée par Dagaut et Gaïl (2007) et repose sur un modèle à trois composants (Paraffines-Naphtènes-Aromatiques) présenté dans le Tableau 3.1 ci-dessous.

Tableau 3.1 Composition du kérosène de substitution employé dans le mécanisme réactionnel et propriétés caractéristiques associées
Adaptée de Dagaut et Gaïl (2007, p. 3997)

Espèce chimique	Pourcentage (% en mole ; sans soufre)	
Paraffines : <i>n-Decane</i> ($C_{10}H_{22}$)	69 %	
Naphtènes : <i>n-Propylcyclohexane</i> (C_9H_{18})	11 %	
Aromatiques : <i>n-Propylbenzène</i> (C_9H_{12})	20 %	
Propriété	Jet A-1	Substitut
Formule moyenne générale	$C_{11}H_{22}$	$C_{9.69}H_{19.56}$
Ratio molaire H/C	2.0	2.05
Ratio carburant/air stœchiométrique f_{st} [kg/kg]	0.0678	0.0677

La cinétique chimique de combustion du kérosène de substitution choisi dans ce mémoire est une version réduite proposée par Saffaripour et al. (2014) de la cinétique d'oxydation du kérosène développée par Mzé-Ahmed et al. (2012) et Dagaut et al. (2014). Son choix repose d'une part sur la validation expérimentale de la cinétique originale (Dagaut et al., 2014) au travers d'une large gamme de pressions (1 à 16 bar), températures (650 K à 1400 K) et richesses ($0.5 < \phi < 2$) qu'il est commun de rencontrer dans une chambre de combustion de turbine à gaz aéronautique. Le deuxième point ayant motivé le choix de la cinétique de Saffaripour et al. (2014) est le développement ultérieur par ces auteurs d'un mécanisme de formation et de croissance des PAHs (le seul à notre connaissance) sur la base de cette cinétique de kérosène. Ce mécanisme intégré de formation des PAHs présente l'avantage de réaliser le couplage entre la cinétique de combustion du carburant et le modèle de formation et de croissance des particules de suie. Le mécanisme global du kérosène et des PAHs comporte 248 espèces et 2089 réactions.

3.3 Modèle de formation des particules de suie

Le mécanisme de combustion du carburant et de formation des précurseurs de suie étant choisi, il convient désormais de définir le modèle de formation des particules. En guise de rappel, un tel mécanisme doit comporter :

- 1) une ou plusieurs réactions de nucléation (NUCL), pour former la particule solide depuis les précurseurs gazeux ;
- 2) un sous-mécanisme de croissance par surface de la particule, essentiellement via l'apport d'acétylène (HACA) ou la condensation des PAHs (COND) ;
- 3) un sous-mécanisme d'oxydation en surface de la particule (OXY) par OH, O₂ et O ;
- 4) un modèle dynamique de coagulation des particules (COAG).

Chacun de ces sous-mécanismes va avoir une influence sur la masse individuelle des particules et leur nombre, résumé par les deux équations suivantes :

$$\frac{dN}{dt} = \left(\frac{dN}{dt} \right)_{NUCL} + \left(\frac{dN}{dt} \right)_{COAG}, \quad (3.1)$$

$$\frac{dM}{dt} = \left(\frac{dM}{dt} \right)_{HACA} + \left(\frac{dM}{dt} \right)_{COND} + \left(\frac{dM}{dt} \right)_{OXY}, \quad (3.2)$$

avec

N : la densité volumique de particule dans le gaz porteur, en $[\#/cm^3]$,

M : la masse individuelle d'une particule.

Cette partie vise à présenter les choix retenus pour ces différents sous-mécanismes. Il sera également question de la méthode numérique employée sous CHEMKIN/CHEMKIN-PRO pour simuler la dynamique de coagulation et déterminer les propriétés de la population de particules (diamètre, nombre, etc.). La validité du mécanisme de formation des suies sera évaluée par la suite au travers d'un cas d'étude de référence.

3.3.1 Cinétique de croissance en surface des particules

Nucléation

La réaction de nucléation considérée dans ce mémoire est celle de dimérisation du pyrène ($C_{16}H_{10}$, aussi noté A_4 dans le Tableau 3.2). Les coefficients associés à la constante de vitesse de cette réaction sont ceux proposés dans les travaux de Chung (2011) portant sur la modélisation de la nucléation des particules de suie. Ces coefficients sont donnés dans le Tableau 3.2. Bien que dans l'étude de Chung (2011) il soit montré que la seule réaction de dimérisation du pyrène sous-estime la concentration en particules produites, et qu'un modèle plus précis devrait considérer en parallèle d'autres réactions comme la dimérisation du coronène ($C_{24}H_{12}$), la limitation imposée par le mécanisme de formation des PAHs (qui s'entend jusqu'au benzopyrène $C_{20}H_{12}$) contraint à ne considérer que cette seule réaction de nucléation avec le pyrène.

Tableau 3.2 Constante de vitesse de la réaction de nucléation par dimérisation du pyrène (A_4)
Adapté de Chung (2011, p. 115)

Réaction (NUCL)	$k = AT^n \exp(-E_A / RT)$ [unités employées : mol, cal, K, cm, s]		
	A	n	E_A
$A_4 + A_4 \rightarrow 32 \text{ C(B)} + 20 \text{ H(s)} + 28.72 \text{ open(s)}$	1.37E50	-11.8	11130

Il est à noter à ce niveau que le formalisme employé pour décrire la réaction de nucléation de même que les réactions de surface ultérieures est celui de Langmuir-Hinshelwood. Sur l'exemple de la réaction exprimée ci-dessus, « (s) » fait référence à une espèce en surface de la particule et « (B) » (pour « Bulk ») désigne une espèce constitutive de la particule (dans le cas présent, le nucléus de la particule est constitué de 32 atomes de carbone pur). La particule est recouverte en sa surface par des sites qui peuvent être soit vides (open(s)), soit comblés par des atomes d'hydrogène (H(s)) (atomes adsorbés). Les coefficients stœchiométriques pour C(B) et H(s) sont obtenus par conservation des espèces lors de la réaction. Celui pour open(s) s'appuie sur la conservation du nombre de sites en surface de la particule, qui dans le cas de la réaction de nucléation est reliée à la densité surfacique de sites Γ de la particule via la relation (adaptée de Reaction-Design, 2013a, p. 286)

$$v_{open(s)} + v_{H(s)} = \Gamma N_A A_c \left(v_{C(B)} \right)^{2/3}, \quad (3.3)$$

avec

$v_{open(s)}$, $v_{H(s)}$, $v_{C(B)}$: les coefficients stœchiométriques respectivement d'open(s), H(s) et C(B),

Γ : la densité surfacique de sites par unité de surface de la particule, en [sites/cm²] (dans le cas des suies, $\Gamma = 2.3E15$ sites/cm² (Zhang, 2009, p. 38)),

N_A : le nombre d'Avogadro (6.022E23 mol⁻¹),

A_c : la surface d'un atome de carbone ($A_c = 2.4E-15$ cm²).

Croissance de la particule par mécanisme HACA

Deux versions du mécanisme de croissance HACA pour particules ont été évaluées dans cette étude. La première et la plus récente est celle d'Appel, Bockhorn et Frenklach (2000a), développé sur des résultats expérimentaux de flammes laminaires prémélangées de carburant du type C₂H_n (n=2, 4, 6). Le deuxième modèle proposé par Kazakov, Wang et Frenklach (1995) est une version antérieure et simplifiée du précédent mécanisme, validé sur des flammes d'éthylène (C₂H₄). Ces deux mécanismes ont été calibrés sur un domaine de pression allant jusqu'à 10 atm. Le détail des réactions de ces mécanismes et les coefficients de cinétique associés sont recensés dans les Tableaux 3.3 et 3.4 respectivement.

Tableau 3.3 Constante de vitesse des réactions du mécanisme HACA-Appel
de croissance des particules de suie
Adapté de Appel, Bockhorn et Frenklach (2000a, p. 130)

Réaction (HACA-Appel)	$k = AT^n \exp(-E_A / RT)$ [unités employées : mol, cal, K, cm, s]		
	A	n	E _A
(1) : $H(s) + H \leftrightarrow open(s) + H_2$	4.20E13	0.0	13000
(2) : $H(s) + OH \leftrightarrow open(s) + H_2O$	1.00E10	0.734	1430
(3) : $open(s) + H \rightarrow H(s)$	2.00E13	0.0	0.0
(4) : $open(s) + C_2H_2 \rightarrow 2 C(B) + H(s) + H$	8.00E7	1.56	3800

Tableau 3.4 Constante de vitesse des réactions du mécanisme HACA-Kazakov
de croissance des particules de suie
Adapté de Kazakov, Wang et Frenklach (1995, p. 114)

Réaction (HACA-Kazakov)	$k = AT^n \exp(-E_A / RT)$ [unités employées : mol, cal, K, cm, s]		
	A	n	E _A
(1) : $H(s) + H \rightarrow open(s) + H_2$	2.50E14	0.0	15980
(-1) : $open(s) + H_2 \rightarrow H(s) + H$	3.90E12	0.0	9310
(2) : $open(s) + H \rightarrow H(s)$	1.00E14	0.0	0.0
(3) : $open(s) + C_2H_2 \rightarrow 2 C(B) + H(s) + H$	8.00E11	0.4	8380

Croissance de la particule par condensation des PAHs

Le mécanisme de condensation des PAHs en surface de la particule de suie est emprunté aux travaux de Meeks et Chou (2006). Ce modèle tient compte de la condensation de six PAHs principaux (benzène (C_6H_6) ; naphtalène (NAPHT) ; phénanthrène (A_3) ; pyrène (A_4) ; phénylacétylène (PHC_2H) ; acénaphtylène (A_2R_5)) pouvant avoir un rôle significatif dans la croissance en masse de la particule. Il est à noter que les constantes de réactions présentées dans le Tableau 3.5 sont données sous la forme de coefficients d'adhésion, plus communément appelés « sticking coefficients ». Ce coefficient s'interprète comme la probabilité pour qu'une collision entre une particule et une molécule de PAH conduise à la fixation du PAH en surface de la particule.

Tableau 3.5 « Sticking coefficients » associés aux réactions du mécanisme de croissance des particules de suie par condensation de PAHs
Adapté de (Chou et Ho, 2006)

Réaction (COND)	Sticking coefficient γ
(1) : $C_6H_6 + 6 H(s) \rightarrow 6 C(B) + 6 \text{ open}(s) + 6 H_2$	0.20
(2) : $PhC_2H + 6 H(s) \rightarrow 8 C(B) + 6 \text{ open}(s) + 6 H_2$	0.21
(3) : $NAPHT + 16 H(s) \rightarrow 10 C(B) + 16 \text{ open}(s) + 12 H_2$	0.10
(4) : $A_2R_5 + 16 H(s) \rightarrow 10 C(B) + 16 \text{ open}(s) + 11 H_2 + C_2H_2$	0.10
(5) : $A_3 + 20 H(s) \rightarrow 14 C(B) + 20 \text{ open}(s) + 15 H_2$	0.10
(6) : $A_4 + 20 H(s) \rightarrow 16 C(B) + 20 \text{ open}(s) + 15 H_2$	0.10

Oxydation

Concernant l'oxydation en surface des particules par le radical OH et l'oxygène atomique O, il a été choisi de reprendre les coefficients de vitesse de réaction associés à l'oxydation du pyrène par OH et O dans le mécanisme de formation des PAHs employé dans ce mémoire de Saffaripour et al (2014). Les coefficients associés à ces deux réactions d'oxydation sont donnés dans le Tableau 3.6

Tableau 3.6 Constante de vitesse des réactions d'oxydation des suies par OH et O
Adapté de (Saffaripour et al., 2014)

Réaction (OXY_OH-O)	$k = AT^n \exp(-E_A / RT)$ [unités employées : mol, cal, K, cm, s]		
	A	n	E_A
(1) : $2 C(B) + H(s) + OH \rightarrow CH_2CO + \text{open}(s)$	2.00E13	0.0	21000
(2) : $2 C(B) + H(s) + O \rightarrow HCCO + \text{open}(s)$	2.00E13	0.0	21000

Le mécanisme d'oxydation des particules par O_2 a été emprunté aux travaux de Leistner et al. (2012) portant sur la modélisation de l'oxydation de plusieurs types de particules carbonées dont notamment les suies produites par un moteur diesel. La combustion du diesel présente des similarités avec celle du kérosène dans les turbines à gaz (les conditions de pression et de

types de flamme au sein des moteurs diesel sont très voisines de celles dans les turbines à gaz). Le détail de ce mécanisme est donné au Tableau 3.7.

Tableau 3.7 Constante de vitesse des réactions d'oxydation des suies par O₂
Adapté de Leistner et al. (2012, pp. 68, 71, 72)

Réaction (OXY_O ₂)	k = AT ⁿ exp(-E _A / RT) [unités employées : mol, cal, K, cm, s]		
	A	n	E _A
(1) : open(s) + 0.5 O ₂ → O(s)	1.50E8	0.0	10750
(2) : O(s) + C(B) → CO + open(s)	5.00E12	0.0	40130
(3) : O(s) + C(B) + 0.5 O ₂ → CO ₂ + open(s)	1.00E11	0.0	36540

Remarque : ces coefficients sont liés aux particules de type « diesel soot » dans l'étude de Leistner et al. (2012)

3.3.2 Modèle de coagulation et méthodes de détermination des propriétés des particules

Le logiciel CHEMKIN-PRO (Reaction-Design, 2013c) comporte un module nommé PARTICLE TRACKING FEATURE® qui permet de déterminer les propriétés du système de particules produit (diamètre moyen, masse, nombre) en tenant compte des phénomènes de coagulation entre particules, mais aussi de leur croissance individuelle via les réactions de surface précédentes. Un point théorique sur la modélisation de la coagulation et les méthodes numériques qui peuvent être employées pour déterminer les propriétés des particules est apporté ici pour comprendre le principe de fonctionnement de ce module.

Coagulation des particules

Le taux de coagulation entre les particules présentes au sein d'un gaz dépend de la fréquence de collision « β » entre celles-ci. Soit une population de particules de tailles non égales, dans laquelle la plus petite particule de taille « 1 » (ou classe « 1 », c'est-à-dire celle issue généralement de la réaction de nucléation) possède un volume v_1 et où les particules de classe « i » possèdent un volume $v_i = i v_1$ et une masse $m_i = i m_1$. L'évolution temporelle de la

population de particules en tenant compte de la coagulation entre les différentes classes peut s'exprimer à l'aide des relations suivantes (tirées de Frenklach, 2002a, p. 2229) :

$$\frac{dN_1}{dt} = -N_1 \sum_{j=1}^{\infty} \beta_{1,j} N_j \quad (3.4)$$

$$\frac{dN_i}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{j,i-j} N_j N_{i-j} - N_i \sum_{j=1}^{\infty} \beta_{i,j} N_j \quad (3.5)$$

$$i = 2, \dots, \infty,$$

avec

t : le temps de réaction, en [s],

N_i : la concentration volumique de particules de classe i , en [particules i /cm³],

$\beta_{i,j}$: la fréquence de collision entre les particules de classe i et j , en [s⁻¹].

Cet ensemble d'équations différentielles constitue la formulation discrétisée de l'équation de coagulation de Smoluchowski (Frenklach, 2002a). Dans le membre de droite de l'équation (3.5), le premier terme fait référence au taux de production de particules de classe i via la somme des collisions entre deux particules de classe inférieure à i (et telle que la somme de leur classe soit égale à i). Le facteur $\frac{1}{2}$ est introduit en raison du fait que chaque collision est comptée deux fois. Le second terme tient compte quant à lui de la diminution des particules i lors de leur collision avec l'ensemble des autres particules (Reaction-Design, 2013a). L'expression de la fréquence de collision β introduite dans les équations (3.4) et (3.5) dépend pour sa part du nombre de Knudsen Kn_i associé à la particule i , qui se définit comme le ratio entre le libre parcours moyen λ_g dans le gaz environnant et le diamètre $D_{p,i}$ de la particule

$$Kn_i = \frac{2 \lambda_g}{D_{p,i}} = \frac{2}{D_{p,i}} \frac{k_B T}{\sqrt{2\pi} d_g^2 P}, \quad (3.6)$$

avec

λ_g : le libre parcours moyen dans le gaz environnant la particule, en [m],

$D_{p,i}$: le diamètre de la particule i en suspension dans le gaz, en [m]

k_B : constante de Boltzmann ($k_B = 1.381\text{E-}23$ J/K),

T : Température du gaz environnant la particule, en [K],

P : Pression du gaz environnant la particule, en [Pa],

d_g : le diamètre moyen des molécules constitutives du gaz environnant, en [m].

Selon la valeur de Kn_i , on peut distinguer trois types de régimes qui caractérisent la manière dont le fluide environnant est perçu par la particule i (adapté de Vancassel, 2003) :

- 1) Le régime continu ($Kn_i \ll 1$ ou $Kn_i \rightarrow 0$) : le fluide est vu par la particule comme un milieu continu.
- 2) Le régime de transition ($Kn_i \sim 1$) : les dimensions de la particule et du libre parcours moyen des molécules environnantes sont du même ordre de grandeur.
- 3) Le régime moléculaire ($Kn_i \gg 1$ ou $Kn_i \rightarrow \infty$) : le fluide est vu comme un milieu discontinu pour la particule.

Pour chacun de ces régimes, il est possible de définir une expression de la fréquence de collision β^c (continu), β^t (transition), β^m (moléculaire) qui est donnée en ANNEXE III.

Il est admis que les particules de suie peuvent être raisonnablement supposées sphériques et évoluer en régime moléculaire pour des pressions atmosphérique ou subatmosphérique (Kazakov et Frenklach, 1998). Toutefois dans des conditions de hautes pressions typiques aux chambres de combustion de turbines à gaz, l'hypothèse de régime moléculaire ne peut plus s'appliquer et la coagulation a lieu cette fois en régime de transition, voire continu. Il convient donc d'étudier les valeurs prises par Kn à plusieurs localisations dans le moteur et pour différentes configurations de puissance moteur (c.-à-d. de pression et de température) afin de choisir l'expression de « β » qui est adaptée. Une telle étude sera menée au chapitre 5.

Il est à mentionner qu'un modèle de coalescence pure des particules a été retenu dans ce mémoire, c'est-à-dire la collision entre deux particules conduit à la formation d'une seule et même particule également sphérique. Par conséquent, aucun modèle d'agrégation des particules n'a été considéré.

Propriétés de la population de particules

Les propriétés de la population de particules générée peuvent être estimées par deux méthodes intégrées dans le module PARTICLE TRACKING FEATURE de CHEMKIN-PRO que sont :

- La méthode discrète par section (Gelbard et Seinfeld, 1980)

Celle-ci repose sur la division de la population de particules en un nombre fini d'intervalles de masse moléculaire ou de dimensions appelés «BINs», dans lesquels les propriétés des particules sont moyennées. La distribution des particules en termes de dimensions ou de masse au sein de ces sections est évaluée au moyen de fonctions polynomiales (ou autres, Reaction-Design, 2013a). La méthode par section permet d'obtenir une représentation détaillée de la distribution des particules. Cependant pour représenter avec exactitude l'étendue des dimensions ou des masses moléculaires possibles, il est souvent nécessaire d'employer un nombre de sections relativement élevé si on souhaite atteindre un niveau de précision acceptable et éviter des problématiques de diffusion numérique. Cette précision nécessaire peut avoir un impact significatif sur le temps de calcul.

- La méthode des moments (Frenklach et Harris, 1987).

Cette méthode introduite par Frenklach et Harris (1987) représente une alternative à la méthode discrète par section, qui est certes moins précise, mais qui offre cependant un coût de calcul relativement plus faible. Contrairement à la méthode par section où une représentation discrète de la fonction de distribution des particules est recherchée, la méthode des moments s'intéresse uniquement aux propriétés moyennes de la population totale de particules, souvent suffisantes dans des applications pratiques. Le principe de cette méthode repose sur la description de l'évolution du système de particules via l'emploi des moments de la fonction de distribution de masse ou de dimensions des particules (Frenklach et Harris, 1987). En pratique, seule la connaissance des premiers moments de cette fonction de distribution est nécessaire pour calculer les caractéristiques principales de la population de particules, à savoir le nombre total de particules N_{Σ} , leur

masse moyenne \bar{m}_p , leur diamètre moyen \bar{D}_p ou encore la surface totale $A_{s,\Sigma}$ en sphère équivalente de la population de particules (paramètre d'intérêt, notamment dans les calculs associés aux réactions de surface) et réduit par conséquent le temps de calcul de manière significative. À titre d'exemple, un calcul de formation des particules de suie dans un réacteur chimique PFR avec un carburant simple (éthylène) met 4 heures 47 minutes dans le cas d'un modèle discret à 32 sections et 12 heures 48 minutes pour une représentation à 55 sections (sur la base d'un critère de convergence de 10^{-9} , avec un ordinateur équipé de deux processeurs Intel® XEON™ de 1.8 GHz, Wen et al., 2006). Ce même calcul prend 1.5 minute avec la méthode des moments (Wen et al., 2006).

Dans une première phase d'étude du modèle de CRN proposé dans ce mémoire, seules les propriétés moyennes de la population de particules (nombre, masse, diamètre) seront nécessaires. En effet, on cherchera essentiellement à comparer les indices d'émissions massiques, en nombre de particules et les diamètres moyens expérimentaux avec ceux calculés. Dans ce contexte, il a été décidé d'utiliser la méthode des moments pour déterminer ces propriétés. Les fondements théoriques associés au calcul des propriétés de la population de particules sur la base de la méthode des moments sont explicités en ANNEXE IV.

Avant d'employer le mécanisme de formation et de croissance des particules de suies avec le CRN, un test de référence permettant de jauger la validité des résultats obtenus avec ce mécanisme doit être réalisé.

3.3.3 Validation du mécanisme de formation des particules de suie

Le test de référence pour cette étape de validation consiste à reproduire numériquement une des expériences de Marr et al. (1994) sur la production de particules de suie à partir d'un mélange $C_2H_4/O_2/N_2$, dans le système expérimental JSR/PFR (Jet-Stirred Reactor / Plug Flow Reactor). Dans ce système, le JSR assure le préchauffage et la formation d'une flamme prémélangée et le PFR est employé pour étudier la région postflamme. Numériquement, le JSR/PFR peut être modélisé au moyen d'un CRN, représenté à la Figure 3.1 et composé de

trois éléments : un PSR modélisant le JSR, un PFR pour la région post flamme (PFR₂) et un autre (PFR₁) pour assurer la transition thermique observée expérimentalement entre le JSR et le PFR postflamme. Les données de paramétrage des réacteurs pour la configuration expérimentale étudiée sont fournies également sur la Figure 3.1. Les données expérimentales utilisées dans cette étape de validation sont les concentrations massiques en suies recueillies en plusieurs points le long du PFR postflamme (PFR₂).

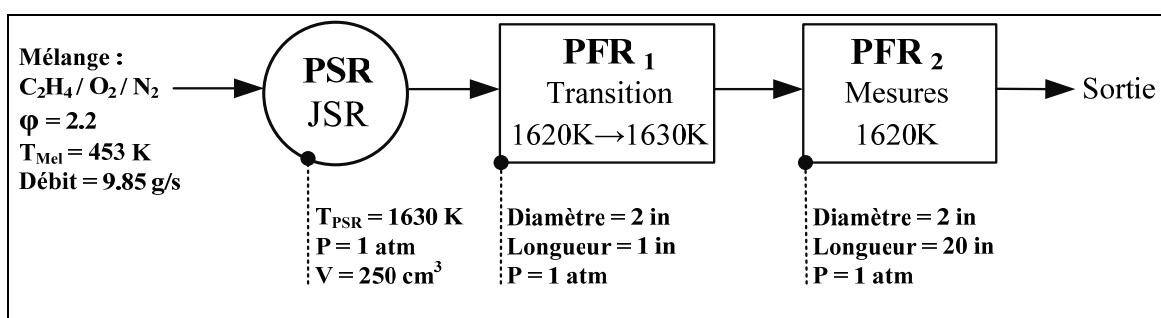


Figure 3.1 CRN pour le système JSR/PFR de l'étude expérimentale de Marr et al. (1994)
Adaptée de Reaction-Design (2013b, pp. 142-145)

Le mécanisme employé pour modéliser la combustion du C₂H₄ et la formation des PAHs jusqu'au pyrène est celui présenté dans l'étude d'Appel, Bockhorn et Frenklach (2000a) (mécanisme et données thermodynamiques disponibles à la référence Appel, Bockhorn et Frenklach, 2000b). Dans cette étude de validation, les deux sous-mécanismes HACA présentés précédemment (HACA-Apple et HACA-Kazakov) seront évalués. Les résultats obtenus seront également comparés à ceux de Chung (2011) pour cette même expérience, où ce dernier a considéré deux modèles de nucléation : la dimérisation par le pyrène seulement et la dimérisation du pyrène et du coronène en parallèle. L'ensemble de ces résultats expérimentaux et numériques sont présentés à la Figure 3.2.

L'analyse de cette figure montre que les modèles avec la nucléation seule par le pyrène ont tendance à sous-estimer les concentrations massiques en suies comparativement aux données expérimentales. Il apparaît que le modèle de nucléation multiple par le pyrène et le coronène parvient à mieux reproduire les valeurs mesurées et ce constat rejoint les remarques faites par

Wen et al. (2005) et Chung (2011) à ce sujet. Cependant, il est à rappeler que la limitation sur les PAHs produits par le mécanisme de Saffaripour et al. (2014) et mentionnée à la partie 3.3.1 contraint à ne considérer que la dimérisation du pyrène dans ce mémoire. Ceci oblige à mettre en perspective les futurs résultats d'émissions de particules calculées par le CRN pour turbines à gaz.

Parmi les modèles de nucléation unique par le pyrène, on constate aussi sur la Figure 3.2 que l'emploi du sous-mécanisme de croissance HACA-Apple tend à sous-estimer encore plus significativement les valeurs de concentration massique par rapport à la version HACA-Kazakov. Cette sous-estimation obtenue avec le sous-mécanisme HACA-Apple a pu être observée dans d'autres études comme celles de Wen et al. (2005), Chung (2011) et Moniruzzaman (2012). Par ailleurs, il est à noter que la version HACA-Kazakov conduit à avoir des résultats semblables au modèle avec nucléation par le pyrène seul de Chung (2011). Sur ce constat, seul le sous-mécanisme de croissance HACA-Kazakov sera considéré dans la suite de ce mémoire.

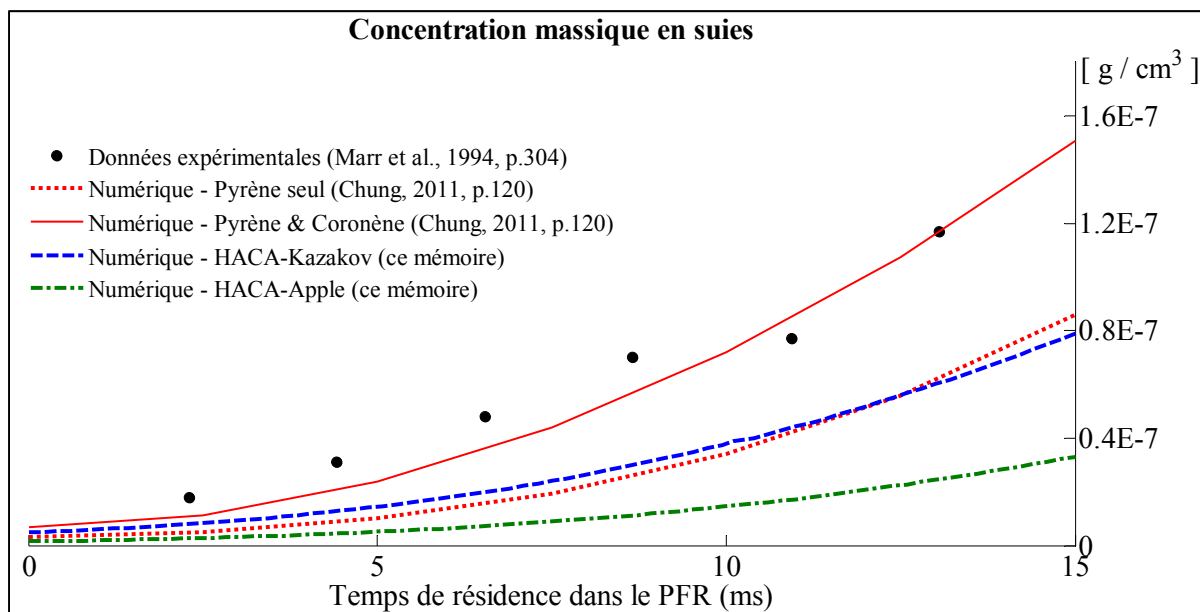


Figure 3.2 Concentration massique en suies le long du PFR₂ du système JSR/PFR

CHAPITRE 4

CALIBRATION ET VALIDATION DU RÉSEAU DE RÉACTEURS CHIMIQUES

4.1 Préambule

La structure du CRN pour turbines à gaz et les cinétiques chimiques étant définies, la troisième étape consiste à calibrer puis valider ce CRN sur un moteur réel, pour lequel des données expérimentales sur différentes phases de fonctionnement sont disponibles. Une première étape consistera à présenter le moteur étudié et ses paramètres de fonctionnement sur différentes phases de vol. Il sera discuté dans un deuxième temps de la méthode de calibration du nombre de PSRs pour la zone primaire et du paramètre de mélange « S ». L'analyse des grandeurs thermodynamiques au sein du moteur et des produits de combustion permettront par la suite de conclure sur la validité du modèle. Il est à préciser que seule la cinétique en phase gazeuse de combustion du kérosène et de formation des PAHs est employée dans ce chapitre (pas de calculs d'émissions de particules).

4.2 Configurations expérimentales de référence

Le modèle de CRN pour turbines à gaz aéronautiques proposé dans ce mémoire a été appliqué au moteur CFM56-2C1 (turbofan civil ; taux de dilution = 6.0 ; poussée nominale de 98 kN) utilisé lors la campagne expérimentale au sol APEX-1 entreprise en 2004 par la NASA. Cette campagne avait pour objectif d'étudier les émissions de particules et de leurs précurseurs en différents points dans le sillage d'un moteur d'avion civil, en fonction de la puissance appliquée et de la composition du carburant (Wey et al., 2006). Les résultats de cette étude APEX-1 serviront au chapitre 5 de point de comparaison expérimental pour les prédictions d'émissions de particules de suies avec le modèle de CRN.

Quatre configurations de fonctionnement du moteur seront considérées dans ce mémoire.

Il s'agit des quatre configurations de vol du Cycle Atterrissage-Décollage (CAD), définies par l'Organisation de l'Aviation Civile Internationale (OACI) pour caractériser les émissions polluantes des moteurs. Le pourcentage de la puissance maximale du moteur associée à ces

configurations est précisé dans le Tableau 4.1. Les quatre configurations étudiées emploient un carburant avec une teneur en aromatique de 21.6 % (carburant type « high aromatic » dans l'étude APEX-1). Cette configuration est celle qui s'approche au mieux de la contenance en aromatique défini pour le carburant de substitution au Tableau 3.1. Les rubriques suivantes présentent les données de configuration spécifiques pour la chambre de combustion et les modules postchambre.

4.2.1 Chambre de combustion

L'évaluation des paramètres thermodynamiques en entrée de chambre de combustion ainsi que les débits d'air et de carburant listés dans le Tableau 4.1 ont été définis sur la base des données expérimentales de l'étude APEX-1 recensées dans le rapport de Wey et al., 2006. Le calcul des pressions totales ($P_{0,3}$) et températures totales ($T_{0,3}$) en entrée de chambre de combustion sur la base des données du rapport de Wey et al. (2006) et présentées dans le Tableau 4.1 est explicité en ANNEXE V.

Tableau 4.1 Conditions d'opération en entrée de chambre de combustion pour le moteur CFM56-2C1, pour quatre configurations de l'étude APEX-1
Adapté de Wey et al. (2006, pp. 45, 60, 61 et 77)

Configuration (Pmax : puissance maximale du moteur)	Décollage (D) « Take-Off » (100 % Pmax)	Montée (M) « Climb » (85 % Pmax)	Approche (A) « Approach » (30 % Pmax)	Ralenti (R) « Idle » (7 % Pmax)
Numéro du test	n°902	n°903	n°859	n°860
Température totale $T_{0,3}$ [K]	735	720	598	476
Pression totale $P_{0,3}$ [atm]	19.9	18.6	8.4	3.5
Débit total carburant \dot{m}_{fuel} [kg/s]	0.891	0.822	0.261	0.113
Débit total d'air \dot{m}_{air_tot} [kg/s]	45.000	43.037	21.220	9.262
Ratio carburant/air f [kg/kg] (f : « Fuel-Air-Ratio »)	0.0198	0.0191	0.0123	0.0122
Température carburant T_{fuel} [K]	300			

Concernant les valeurs des paramètres géométriques pour la chambre de combustion et la répartition des débits d'air dans chacune de ses zones, celles-ci ont été définies à partir des données publiques recueillies pour le prototype de chambre de combustion annulaire E3 (« Energy Efficient Engine ») conçu par la NASA et General Electric (Burrus, 1980) et développé sur la base d'un moteur militaire General Electric F101-PV. Le choix de cette chambre repose sur sa configuration (chambre annulaire à une rangée d'injecteur) et son ratio $L/H = 2.4$ (longueur chambre sur hauteur de chambre) semblables aux chambres de combustion des moteurs CFM56 SAC (« Single Annular Combustor ») développées par General Electric et Snecma et qui possèdent un ratio $L/H \sim [2.2 - 2.4]$ (Bahr, 1987 ; Burrus, Sabla et Bahr, 1980). La répartition du débit d'air total issu du compresseur \dot{m}_{air_tot} dans chacune des zones (ZP, ZS et ZD) ainsi que la fraction d'air allouée au refroidissement des parois sont également fournies dans le rapport de Burrus, Sabla et Bahr (1980). Il est à noter que la répartition d'air proposée est supposée être identique quelle que soit la configuration de fonctionnement du moteur. Cette répartition est donnée dans le Tableau 4.2.

Tableau 4.2 Répartition des débits d'air considérée, issue de la chambre de combustion F101-PV (configuration « Full-Annular »)
Adapté de (Burrus, Sabla et Bahr, 1980, p. 85)

Débit d'air	Pourcentage de \dot{m}_{air_tot}
\dot{m}_{air_ZP} (zone primaire)	32.7 %
$\dot{m}_{air_1ere_Dil}^{\circ}$ (1 ^{ère} dilution)	17.9 %
$\dot{m}_{air_2eme_Dil}^{\circ}$ (2 ^{ème} dilution)	27.8 %
$\dot{m}_{air_paroi_tot}$ (refroidissement parois)	21.6 %

Les données des Tableaux 4.1 et 4.2 permettent de calculer la richesse du mélange dans la zone primaire pour les quatre configurations de vol (Tableau 4.3), à l'aide de la relation

$$\varphi_{ZP} = \frac{f \cdot \frac{\dot{m}_{air_tot}}{\dot{m}_{air_ZP}}}{f_{st}}, \quad (4.1)$$

en considérant le ratio carburant/air stœchiométrique en masse f_{st} du kérosène de substitution donné au Tableau 3.1 ($f_{st} = 0.0677$).

Tableau 4.3 Richesse moyenne dans la zone primaire pour les quatre configurations étudiées

Configuration	Richesse zone primaire ϕ_{ZP}
Décollage	0.90
Montée	0.86
Approche	0.56
Ralenti	0.55

Le découpage des zones ZP, ZS et ZD de la chambre de combustion et leurs dimensions respectives sont quant à eux détaillés en ANNEXE VI.

4.2.2 Modules turbines et tuyère

La définition des paramètres associés aux modules turbines et tuyère a été réalisée de la façon suivante :

- Pressions totales en sortie des modules turbines THP et TPB ($P_{0,45}$ et $P_{0,5}$)

Seuls les ratios de pression totale Π_{THP} et Π_{TPB} (définis par la relation (2.15)) pour la configuration décollage sont connus et proviennent de données de l'Office National d'Étude et de Recherche Aéronautique (ONERA, France). Ceux-ci sont relatifs à la gamme de moteurs CFM56. Les ratios de pression totale pour les configurations montée (M), approche (A) et ralenti (R) ont été établis à partir de ceux au décollage (D) en supposant la propriété suivante :

$$\frac{\Delta P_{0_THP_j}}{\Delta P_{0_TOT_j}} = \frac{P_{0,4_j} - P_{0,45_j}}{P_{0,4_j} - P_{0,atm_j}} = \text{constante}_1; \quad (4.2)$$

$$\frac{\Delta P_{0_TBP_j}}{\Delta P_{0_TOT_j}} = \frac{P_{0,45_j} - P_{0,5_j}}{P_{0,4_j} - P_{0,atm_j}} = \text{constante_2};$$

quel que soit $j = D, M, A, R$.

Cette hypothèse signifie que la part de chaque module turbine dans la détente totale des gaz jusqu'à l'air libre (à la pression $P_{0,atm}$) est conservée quelle que soit la configuration de vol. Le Tableau 4.4 qui suit donne pour les quatre configurations de vol ces ratios de pression totale entre l'entrée et la sortie des modules turbines.

Tableau 4.4 Conditions d'opération considérées dans les modules turbines

Configuration	Décollage	Montée	Approche	Ralenti
Ratio de pression totale THP Π_{THP} (*d'après données de l'ONERA)	0.30 *	0.30	0.35	0.47
Ratio de pression totale TBP Π_{TBP}	0.23 *	0.24	0.39	0.63
Pression atmosphérique externe $P_{0,atm}$ (atm) (Wey, 2006, p.45)	0.9			

- Pressions totales en sortie de tuyère ($P_{0,9}$)

La pression totale au sein de la tuyère est supposée constante et égale à celle en sortie de turbine TBP (hypothèse réaliste en comparaison à d'autres études sur l'évolution de l'écoulement postchambre telle que celle de Starik et al. (2002)).

$$P_{0,9} = P_{0,5} \quad (4.3)$$

- Paramètres géométriques (sections et longueurs des modules)

Ces paramètres ont été estimés sur la base d'un plan en coupe de CFM56-3 fourni par l'ONERA. Cette version du CFM56 a une gamme de poussées assez similaires à celle du CFM56-2C1 utilisé dans l'étude expérimentale APEX-1.

Les valeurs des paramètres géométriques pour le CRN des modules turbines et tuyère sont fournies en ANNEXE VI.

4.3 Calibration du CRN

La calibration du modèle de CRN proposée dans ce mémoire consiste à définir dans une première phase le nombre de PSRs à employer pour modéliser la zone primaire, puis de déterminer la valeur du paramètre de mélange « S » pour chaque configuration moteur. Ces deux calibrations s'appuient sur l'analyse des émissions de CO et NO_x en sortie du moteur, dont les valeurs expérimentales sont connues pour les quatre configurations étudiées (Tableau 4.5).

Le choix de ces deux polluants pour la calibration du modèle repose sur les conditions spécifiques dans le moteur pour lesquelles ils se forment. Les émissions maximales de NO_x ont lieu lorsque les températures rencontrées dans la chambre sont maximales, c'est à dire pendant les phases de puissance maximale du moteur (par exemple au décollage). À l'inverse, les émissions de CO seront plus élevées dans les configurations de faible puissance du moteur (ralenti), là où la pression et la qualité du mélange air-carburant sont les plus faibles. On a ainsi deux types d'émissions qui sont représentatifs des conditions extrêmes de fonctionnement du moteur.

Il est d'usage d'employer pour ces deux polluants l'indice d'émissions en masse de CO et de NO_x défini pour chacun par

$$EICO = \frac{\dot{m}_{CO}}{\dot{m}_{fuel}}, \quad (4.4)$$

$$EINO_X = \frac{\dot{m}_{NO} \frac{MW_{NO_2}}{MW_{NO}} + \dot{m}_{NO_2}}{\dot{m}_{fuel}}, \quad (4.5)$$

avec

\dot{m}_{CO} , \dot{m}_{NO} , \dot{m}_{NO_2} : le débit massique de CO, NO et NO₂ en sortie du moteur, en [g/s],

MW_{NO} , MW_{NO_2} : la masse molaire du NO et du NO₂, en [g/mol],

\dot{m}_{fuel} : le débit massique de carburant injecté, en [kg/s].

Tableau 4.5 Indice d'émissions du CO et des NO_x pour les configurations de l'étude APEX-1 étudiées

Adapté de Wey et al. (2006, p. 77)

Configuration	Décollage (D) (test n° 902)	Montée (M) (test n° 903)	Approche (A) (test n° 859)	Ralenti (R) (test n° 860)
<i>EICO-exp</i> [g/kg-fuel]	2.25	1.59	5.10	31.03
<i>EINO_x-exp</i> [g/kg-fuel]	17.52	16.99	9.29	4.29

En complément de la cinétique de combustion du kérosène, un mécanisme de formation des oxydes d'azotes (NO_x) a été ajouté pour cette étape de calibration. Il s'agit du San Diego Mechanism-Nitrogen Chemistry (UC_SanDiego, 2004), développé en grande partie sur la base du mécanisme de formation des NO_x en flamme de diffusion de Hewson et Bollig (1996). Cette cinétique du San Diego Mechanism comprend entre autres les sous-mécanismes de formation des NO par voie thermique et rapide (ou de Fenimore), du NO₂ et du N₂O. L'implantation de ce mécanisme avec celui du kérosène ne génère pas de réactions dupliquées (les 2 mécanismes sont découplés) et n'a pas de répercussions significatives sur les produits de combustion de la partie kérosène (variations des concentrations molaires très inférieures au pourcent).

4.3.1 Calibration du nombre de PSRs pour la zone primaire

Comme toute discrétisation d'un phénomène continu, il est naturel de s'attendre à avoir une dépendance des résultats vis-à-vis du pas d'échantillonnage choisi. Dans notre cas d'étude, le pas d'échantillonnage qui permet de discrétiser la distribution normale de la fraction de mélange air-carburant est piloté par le nombre de PSRs utilisé pour la zone primaire. Une étude de sensibilité sur ce nombre de PSRs comparable à celle d'Allaire (2006) a été mise en place. La méthode employée consiste à déterminer le nombre de PSRs à partir duquel les valeurs des émissions de CO et NO_x, pour un paramétrage du moteur fixé, se stabilisent dans un intervalle de tolérance acceptable. Pour cela, on commence par définir l'erreur relative sur les indices d'émissions étudiés en fonction du nombre de PSRs n par :

$$\Delta EIXnum(n) = \left| \frac{EIXnum(n) - EIXnum_{\infty}}{EIXnum_{\infty}} \right|, \quad (4.6)$$

avec

$EIX-num(n)$ ($X = CO$ ou NOX): l'indice d'émissions de l'espèce considérée obtenu avec un nombre n de PSRs pour la zone primaire, en [g/kg-fuel],

$EIX-num_{\infty}$: la moyenne des 20 dernières valeurs de $EIX-num(n)$ dans l'étude de sensibilité (c.-à-d. pour $n = 141$ à 160). L'analyse d' $EIX-num$ en fonction de n montre une convergence de cette grandeur vers une valeur $EIX-num_{\infty}$ et on suppose que la moyenne des dernières itérations d' $EIX-num(n)$ représente une assez bonne approximation de la valeur finale $EIX-num_{\infty}$.

À ce stade de la calibration du modèle, la valeur du paramètre de mélange S pour chacune des configurations de vol n'a pas été encore définie. L'analyse de la Figure 2.4 où sont données des valeurs du paramètre S pour des chambres de combustion aéronautiques montre que la valeur maximale de S est généralement située en dessous de $S = 0.85$. Les calculs de sensibilité sur le nombre de PSRs ont donc été réalisés à cette valeur de S pour les quatre configurations moteur. Celle-ci s'avère être suffisamment élevée pour tenir compte des effets de discrétisation (plus S est grand, plus la distribution est étendue en termes de richesses).

La Figure 4.1 donne l'évolution de l'erreur relative sur les émissions de CO ($\Delta EICO-num$) et NO_X ($\Delta EINO_X-num$) calculée dans chacune des configurations en fonction du nombre de PSRs. Il est à mentionner que par souci de lisibilité, seules les configurations les plus sensibles ont été représentées sur cette figure pour chacun des deux types d'émission. Le choix des intervalles de tolérance sur les erreurs relatives associées à $EICO-num$ et $EINO_X-num$ a été fixé à **15 %** et **5 %** respectivement. Ce choix s'appuie sur une étude de Lee (2005) dans laquelle il est montré que l'incertitude sur les mesures expérimentales des indices d'émissions lors de la certification de moteurs récents (selon le protocole de l'OACI) peut être évaluée à : incertitude $EICO-exp = \pm 23 \%$; incertitude $EINO_X-exp = \pm 16 \%$ (avec un intervalle de confiance de 90 %).

Sur ce critère, le nombre de PSRs pour la zone primaire a donc été fixé à $n = 135$ pour les 4 configurations de vol (erreurs relatives maximales associées à cette valeur de n : $\Delta EICO-num \leq 13.6\%$; $\Delta EINO_x-num \leq 1.1\%$). Le nombre de PSRs déterminé dans ce mémoire s'avère plus important que celui évalué par Allaire (2006) dans son étude avec les mêmes intervalles de tolérance (utilisation par cet auteur de 16 PSRs). Toutefois, il est à préciser qu'Allaire (2006) a couplé à son modèle de CRN une cinétique de combustion du propane (C_3H_8) qui est bien moins conséquente en nombre de réactions et donc en termes de calculs qu'une cinétique détaillée de kérosène. Concernant les autres CRNs avec zone primaire multi-PSRs (Rizk, 2002 ; Martini, 2008 ; Rezvani, 2010), aucun de ces auteurs n'a étudié la problématique du nombre de PSRs pour la zone primaire et son influence sur les émissions calculées.

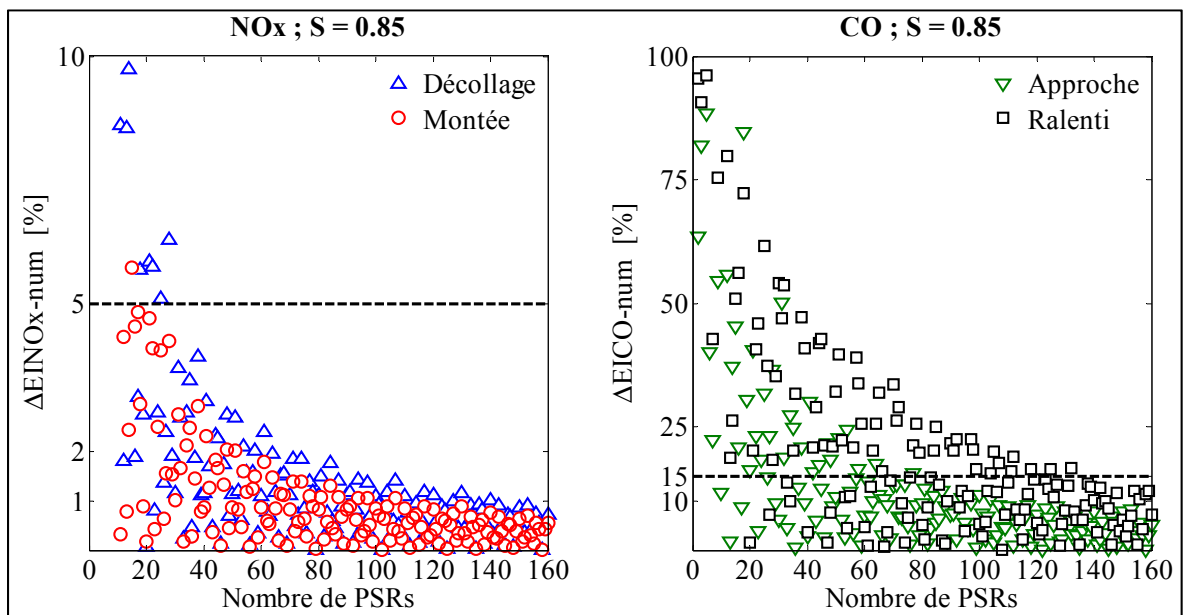


Figure 4.1 Erreur relative sur les indices d'émissions de NO_x et de CO calculés en fonction du nombre de PSRs de la zone primaire

4.3.2 Calibration du paramètre de mélange « S »

Dans des modèles précédents de CRN avec zone primaire multiréacteurs et dans lesquels la notion de paramètre de mélange S a été introduite (Allaire, 2006 ; Martini, 2008), la calibration de ce paramètre a été réalisée à partir de l'analyse des émissions de CO et NO_x en sortie de moteur. Dans ces études, la valeur retenue pour S dans une configuration moteur donnée est celle qui minimise au mieux l'écart entre les indices d'émissions du CO et des NO_x obtenues numériquement et ceux expérimentaux.

La méthodologie de calibration du paramètre S proposée dans ce mémoire est quelque peu différente de celles employées par Allaire (2006) ou Martini (2008) et repose sur l'analyse de la Figure 4.2. Sur cette figure où sont représentés les évolutions des émissions de quelques polluants caractéristiques en fonction de la puissance moteur appliquée, on peut observer que les courbes d'émissions du CO et des NO_x ont des évolutions opposées avec la puissance, avec une prédominance des émissions de CO sur celles des NO_x à faible puissance et réciproquement à forte puissance.

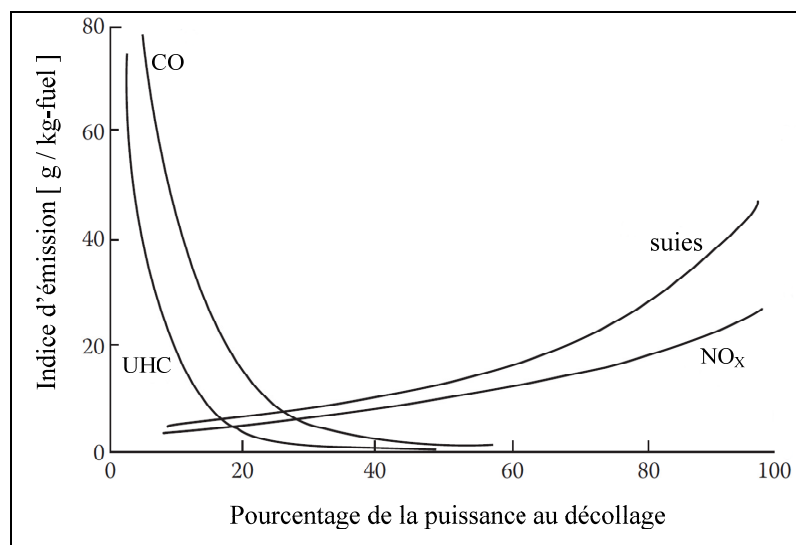


Figure 4.2 Émissions caractéristiques en sortie d'une turbine à gaz en fonction de la puissance moteur
Adaptée de Lefebvre et Ballal (2010, p. 367)

À partir de ce constat, une méthode de calibration optimisée pour le paramètre de S serait de déterminer la valeur de ce paramètre qui conduit à l'écart relatif le plus faible entre les valeurs numériques et expérimentales d' $EICO$ et $EINO_X$ tout en considérant l'importance relative de chacune de ces émissions avec la puissance moteur. Sur cette base, la méthode de calibration proposée consiste à déterminer la valeur du paramètre S qui minimise la quantité δ_{NOx-CO} définie par

$$\delta_{NOx-CO} = FP_{max} \frac{|EINO_X exp - EINO_X num|}{EINO_X exp} + (1 - FP_{max}) \frac{|EICO exp - EICO num|}{EICO exp} \quad (4.7)$$

avec

$EICO-exp$, $EINO_X-exp$: les mesures expérimentales des indices d'émissions du CO et des NOx (Tableau 4.5),

$EICO-num$, $EINO_X-num$: les valeurs des indices d'émissions du CO et des NOx calculées numériquement par le CRN,

FP_{max} : la fraction de la puissance maximale du moteur associée à la configuration de vol étudiée ($FP_{max} (D) = 1$; $FP_{max} (M) = 0.85$; $FP_{max} (A) = 0.30$; $FP_{max} (R) = 0.07$).

Ce coefficient permet de pondérer l'importance relative de chacune des émissions selon la puissance moteur.

Les valeurs calibrées du paramètre de mélange ($S-calib$) obtenues dans chaque configuration par la méthode introduite précédemment sont recensées dans le Tableau 4.6. Dans ce même tableau figurent également les valeurs d' $EICO-num$ et $EINO_X-num$ obtenues pour ces valeurs de S . La distribution de la fraction de mélange air-carburant associé à ce paramétrage pour les PSRs de la zone primaire est quant à elle donnée en ANNEXE VII.

De manière générale, les valeurs prises par le paramètre S sont comprises dans la gamme de valeurs obtenues pour d'autres chambres de combustion aéronautiques (Figure 2.4), avec toutefois une valeur de S assez élevées pour la configuration ralenti. Une valeur aussi élevée de S pour cette configuration a pu être également observée avec le CRN de Martini (2008), qui possède une configuration assez similaire à celui de ce mémoire. Ce résultat pourrait

s'expliquer par des conditions d'inflammation et de mélange entre l'air et le carburant qui sont plus défavorables à faible puissance, entre autres dues aux plus faibles débits, pressions et températures rencontrées. Pour ce qui est de l'évolution de S avec la richesse ϕ_{ZP} , l'allure en cloche observée sur la Figure 2.4 n'a pas été retrouvée. On constate plutôt une décroissance continue de S à mesure que ϕ_{ZP} augmente (c.-à-d. à mesure que la puissance augmente). Cette tendance rejoint à nouveau celle obtenue par Martini (2008) dans son étude. Concernant l'évolution des valeurs d' $EICO-num$ et $EINO_X-num$ pour ces valeurs de S , celles-ci sont en accord avec les tendances observées expérimentalement, à savoir une croissance d' $EINO_X$ et une décroissance d' $EICO$ avec la puissance.

Tableau 4.6 Valeurs du paramètre de mélange S calibrées et indices d'émissions associés

Configuration	Décollage	Montée	Approche	Ralenti
S_{calib}	0.61	0.62	0.63	0.83
$EINO_X-num$ [g/kg-fuel]	17.57	16.99	10.95	7.12
$EINO_X-exp$ [g/kg-fuel]	17.52	16.99	9.29	4.29
Erreur relative $EINO_X$	0.3 %	0.0 %	17.9 %	66.0%
$EICO-num$ [g/kg-fuel]	0.06	0.08	4.96	27.13
$EICO-exp$ [g/kg-fuel]	2.25	1.59	5.10	30.89
Erreur relative $EICO$	97.3 %	95.0 %	2.7 %	12.2 %

Au sujet des valeurs prises par ces émissions, il apparaît que les émissions de NO_x sont en bon accord avec les données expérimentales pour une gamme de puissance allant de la configuration décollage (100 % P_{max}) à celle d'approche (30 % P_{max}). Les émissions de CO calculées sont quant à elles en bon accord avec les valeurs expérimentales dans le cas des configurations faible puissance (approche et ralenti). Par contre dans les configurations décollage et montée, les valeurs d' $EICO-num$ sont relativement faibles et présentent des erreurs relatives significatives par rapport aux données expérimentales. Une telle sous-estimation dans ces configurations de vol a pu être observée avec le CRN d'Allaire (2006) (configuration « Engine 1 » et particulièrement « Engine 3 ») qui a une structure assez

analogue à celui développé dans ce mémoire. Aucune analyse n'a cependant été faite par Allaire (2006) pour expliquer la source de ces écarts.

Ce résultat reflète en réalité la difficulté de modéliser avec précision les émissions de CO et NO_x simultanément sur toute la gamme de puissance du moteur. En effet, les évolutions et les niveaux d'émissions de ces deux polluants sont relativement opposés selon la puissance moteur appliquée, comme le souligne la Figure 4.2. Il se peut également que la structure du CRN choisi, particulièrement pour les zones primaire et secondaire, ne soit pas non plus la plus pertinente pour étudier les émissions de CO, car on néglige dans ce modèle l'influence de l'écoulement d'air de refroidissement en proche paroi (qui peut être une des sources notables de production de ce polluant, Lefebvre et Ballal, 2010) ainsi que les phénomènes de recirculation des gaz brûlés au niveau de la zone primaire, qui peuvent avoir eux aussi un impact sur ces émissions .

Le point essentiel à retenir sur cette première analyse des résultats est que les émissions de NO_x à forte puissance et de CO à basse puissance sont satisfaisantes relativement aux données expérimentales ; ces deux polluants étant caractéristiques de chacun des régimes extrêmes du moteur. De plus, on peut remarquer sur la Figure 4.2 que les émissions de NO_x et de suies ont des profils d'évolution très similaires. Ainsi, les valeurs relativement satisfaisantes obtenues pour $EINO_x$ -num sur la plage de configuration allant de l'approche au décollage peuvent présumer un paramétrage du CRN physiquement réaliste pour le calcul ultérieur des émissions de suies dans ces configurations.

4.4 Validation du CRN

Le CRN étant désormais calibré pour chacune des configurations moteur étudiée, il convient dès lors d'analyser les concentrations obtenues en sortie de moteur pour plusieurs produits de combustion caractéristiques ainsi que les profils d'évolution des grandeurs thermodynamiques au sein du CRN. L'analyse de ces résultats permettra de conclure sur la validité des conditions thermodynamique et chimique au sein du modèle de CRN.

4.4.1 Évolutions d' $EINO_x$ et d' $EICO$ en fonction du paramètre « S »

Au-delà des valeurs d' $EINO_x-num$ et d' $EICO-num$ obtenues pour les valeurs spécifiques de S dans chaque configuration, une analyse des émissions de CO et NOx en fonction de S doit être conduite. Cette étude vise à évaluer si les évolutions de ces deux polluants avec S sont physiquement réalistes et plus généralement, si la méthode de calibration s'appuie dès le départ sur des données cohérentes. Les Figures 4.3 et 4.4 représentent respectivement les évolutions des indices d'émissions des NOx et du CO respectivement en fonction du paramètre de mélange S dans chacune des configurations étudiées. Les valeurs expérimentales de ces indices obtenues pour le moteur CFM56-2C1 dans l'étude APEX-1 sont indiquées sur l'axe des ordonnées de chacun des graphes : décollage (D_exp), Montée (M_exp), Approche (A_exp), Ralenti (R_exp).

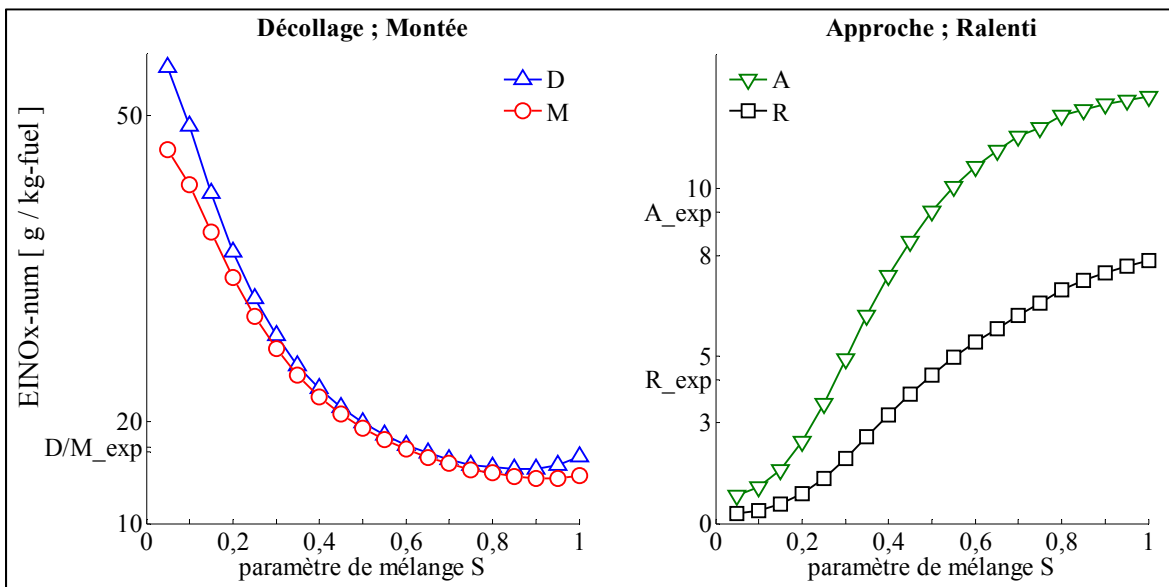
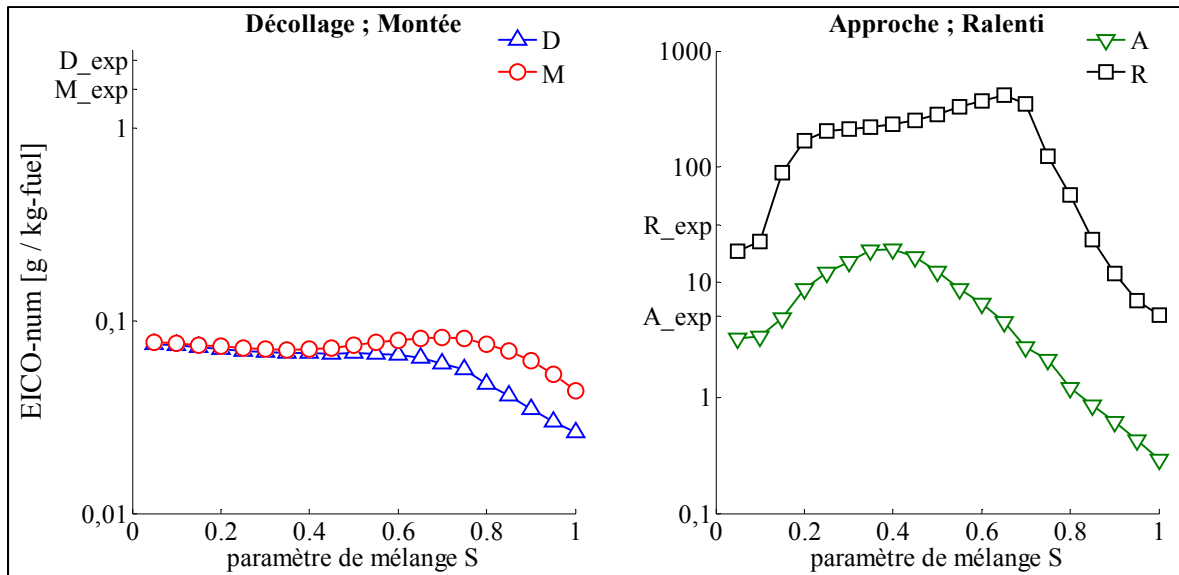


Figure 4.3 $EINO_x-num$ en fonction du paramètre de mélange S



Remarque : l'axe des ordonnées est en échelle log

Figure 4.4 *EICO-num* en fonction du paramètre de mélange S

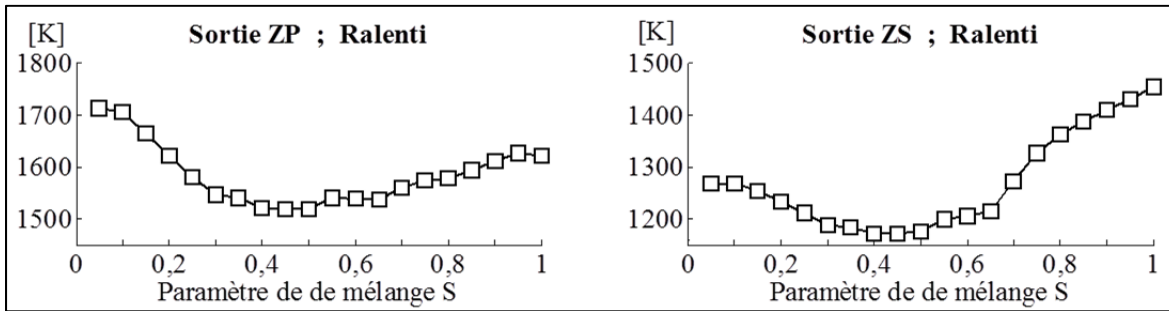
Une première remarque sur les Figures 4.3 et 4.4 est de noter que les configurations faible puissance (approche et ralenti) et forte puissance (décollage et montée) peuvent être regroupées selon ces deux catégories quant à leur profil d'évolution d' $EINO_X$ et d' $EICO$ en fonction de S . Selon cette distinction, on peut mettre en évidence que :

- Configurations faible puissance (approche et ralenti)

L'accroissement des émissions de NO_X observé à mesure que S augmente s'explique principalement par une augmentation de la quantité de mélange air-carburant attribuée aux PSRs ayant une richesse proche de la stœchiométrie ($\varphi = 1$) (rappel : le paramètre S joue sur l'étendue de la plage de richesses rencontrées dans la zone primaire). En effet, il est possible de montrer que la production de NO_X en fonction de la richesse suit une évolution parabolique, avec un pic d'émissions pour les richesses proches de la stœchiométrie (Lefebvre et Ballal, 2010).

L'allure en cloche des émissions de CO avec S tient quant à elle à une proportion de PSRs dans la zone primaire dans lesquels la richesse et la température ne sont pas suffisamment élevées pour que l'inflammation du mélange puisse avoir lieu. Ce phénomène explique la diminution de la température totale moyenne observée sur la

Figure 4.5 pour la zone primaire et secondaire jusqu'à une certaine valeur seuil de $S \sim 0.5$. Au-delà de cette valeur, les richesses plus élevées obtenues dans les PSRs favorisent la combustion du mélange et donc une diminution de la production de CO.



La température en sortie de zone primaire est la température moyenne du mélange de gaz issu des n -PSRs de cette zone

Figure 4.5 Température totale en sortie des zones primaire (ZP) et secondaire (ZS) en fonction du paramètre de mélange S , configuration ralenti

- Configurations fortes puissances (décollage et ralenti)

À l'inverse des configurations faibles puissances, on distingue aux fortes puissances une diminution des émissions de NO_x à mesure que S augmente, qui s'atténue progressivement aux valeurs de S plus élevées. Une telle tendance aux fortes puissances pour ces émissions a pu être aussi observée avec le CRN de Martini (2008). Cette évolution des émissions de NO_x s'explique à nouveau par l'analyse des profils de température dans les zones primaire et secondaire en fonction de S donnés à la Figure 4.6. Les hautes températures rencontrées dans la zone primaire favorisent la voie de production des NO_x thermiques. De ce fait, lorsque la température dans cette zone diminue avec S croissant, la production de NO_x décroît par la même occasion. Le regain observé dans la production des NO_x (configuration décollage) pour les valeurs de S élevées prend source dans la zone secondaire, où les températures suffisamment élevées pour ces valeurs de S et le fort apport en air de dilution favorisent la production de NO_x .

L'évolution décroissante des émissions de CO dans ces deux configurations forte puissance résulte pour sa part d'une meilleure oxydation de cette espèce dans la zone secondaire et de dilution à mesure que la température augmente avec S dans ces deux

zones. On remarque également que quelle que soit la valeur de S , les valeurs d' $EICO$ calculées par le CRN restent très inférieures à celles mesurées dans ces configurations.

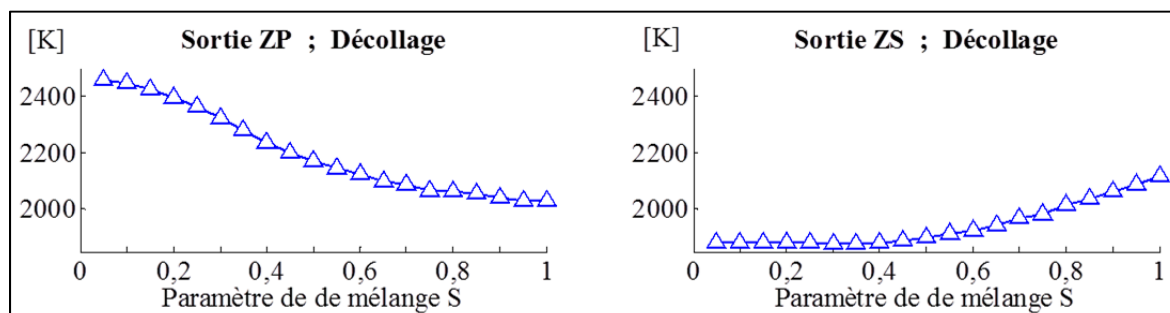


Figure 4.6 Température totale en sortie des zones primaire (ZP) et secondaire (ZS) en fonction du paramètre de mélange S , configuration décollage

4.4.2 Produits de combustion caractéristiques en sortie de moteur

Le Tableau 4.7 donne les valeurs des fractions molaires obtenues par le modèle de CRN pour quelques espèces caractéristiques de la composition des gaz brûlés, en sortie de moteur. Celles-ci sont comparées aux données expérimentales de l'étude APEX-1 fournies dans le rapport de Wey et al. (2006).

L'analyse des données du Tableau 4.7 montre une assez bonne représentativité par le modèle numérique des niveaux de concentration en émissions majeures telles que H_2O et CO_2 , avec des résultats cependant moins précis à faible puissance. Les bons résultats obtenus pour NO à forte puissance moteur (décollage et montée) et CO à faible puissance (approche et ralenti) rejoignent les remarques précédentes faites pour $EINO_x$ et $EICO$ dans chacun de ces régimes. Bien que les résultats sur les espèces plus minoritaires telles que NO_2 et le N_2O soient relativement moins précis que ceux pour le NO dans les configurations forte puissance, les faibles concentrations en NO_2 et N_2O devant celle de NO à ces régimes moteur ont peu d'influence sur la valeur finale d' $EINO_{x-num}$. La méthodologie de calibration du paramètre S à haute puissance qui s'appuie essentiellement sur les émissions de NO_x n'est donc pas remise en question.

Au sujet du cas particulier de la configuration ralenti, les fractions molaires calculées pour NO et dans une moindre mesure pour NO₂ sont moins satisfaisantes. Malgré des concentrations en CO pour cette configuration qui sont convenables, une attention particulière devra être portée sur ce régime lors de l'étude future sur les émissions de suies (la Figure 4.2 a montré en effet que les NO_x et les suies ont des évolutions semblables avec la puissance moteur).

Tableau 4.7 Fractions molaires de produits combustion caractéristiques en sortie de moteur (valeurs APEX-1 tirées de Wey et al., 2006, p. 77 et 108)

Espèce	Référence	Décollage	Montée	Approche	Ralenti
H ₂ O (%)	Mémoire	4.20	4.07	2.67	2.88
	APEX-1	4.33	4.05	2.99	2.83
	Écart relatif (%)	3,0	0,5	10,7	1,8
CO ₂ (%)	Mémoire	4.17	4.04	2.64	2.82
	APEX-1	4.04	3.90	2.53	2.48
	Écart relatif (%)	3,2	3,6	4,3	13,7
CO (ppm)	Mémoire	1.27	1.56	62.00	336.52
	APEX-1	44.88	30.71	63.53	384.92
	Écart relatif (%)	97,2	94,9	2,4	12,6
NO (ppm)	Mémoire	207.28	193.25	69.77	34.09
	APEX-1	197.32	184.86	59.97	18.51
	Écart relatif (%)	5,0	4,5	16,3	84,2
NO ₂ (ppm)	Mémoire	6.48	6.28	13.59	19.68
	APEX-1	15.85	14.55	10.54	13.86
	Écart relatif (%)	59,1	56,8	28,9	42,0
N ₂ O (ppm)	Mémoire	0.47	0.44	0.95	0.50
	APEX-1	0.81	0.79	0.76	0.75
	Écart relatif (%)	42,0	44,3	25,0	33,3

L'étude des produits de combustion en sortie de moteur a été complétée par l'ajout d'un mécanisme d'oxydation du soufre (Hughes et al., 2005) à la cinétique de combustion du kérosène. Ce mécanisme permet de produire entre autres les espèces du type SO_x et H₂SO₄ (précurseurs sulfatés d'aérosols). La connaissance des concentrations en H₂SO₄ et du paramètre d'efficacité de conversion du soufre ε défini par

$$\varepsilon = \frac{([\text{SO}_3] + [\text{H}_2\text{SO}_4])}{([\text{SO}_2] + [\text{SO}_3] + [\text{H}_2\text{SO}_4])} \quad (4.8)$$

renseignent sur la thermochimie qui s'opère au sein des modules postchambre, notamment dans les turbines (Starik et al., 2002 ; Moniruzzaman et Yu, 2012). La quantité de soufre injectée dans le carburant a été fixée à 530 ppm en masse selon la valeur mesurée au cours de l'étude APEX-1 (configuration « high aromatics »). Les résultats associés aux émissions de SO_x et H_2SO_4 sont donnés au Tableau 4.8. L'analyse des données du Tableau 4.8 montre que les émissions de SO_2 sont satisfaisantes à forte puissance et restent convenables à faible puissance pour une espèce présente à des concentrations aussi faibles (quelques ppm). De plus, les valeurs du paramètre ε dans chacune des configurations sont dans l'ensemble correctes comparativement aux valeurs rencontrées dans la littérature ($2 < \varepsilon < 5$, sur l'analyse des études de Tremmel et Schumann, 1999 et Kinsey, 2009) et à la valeur de $\varepsilon = 2.1 \%$ calculé par Moniruzzaman et Yu (2012) pour le même moteur dans la configuration ralenti (avec un carburant contenant 383 ppm en masse de soufre dans leur étude).

Tableau 4.8 Fractions molaires des composés à base de soufre en sortie de moteur
(valeurs APEX-1 tirées de Wey et al., 2006, p. 108)

Espèce	Référence	Décollage	Montée	Approche	Ralenti
SO_2 (ppm)	Mémoire	8.75	8.48	5.57	6.14
	APEX-1	9.17	9.29	7.26	7.34
	Écart relatif (%)	4,6	8,7	23,3	16,3
SO_3 (ppm)		0.37	0.35	0.20	0.12
H_2SO_4 (ppm)		1.91E-3	2.14E-3	6.19E-3	0.45E-3
« Sulfur conversion efficiency » ε (%)		4.09	4.02	3.65	1.91

4.4.3 Thermodynamique du CRN

Cette dernière partie du processus de validation du CRN traite des résultats obtenus pour les évolutions de température, pression, vitesse et temps de résidence des gaz brûlés dans chaque zone du CRN et pour chaque configuration de vol. Cependant, il est à mentionner que le peu de données expérimentales complètes et accessibles sur les moteurs aéronautiques, de même

que le nombre restreint d'études sur ce type de CRN, contraint à faire une validation d'ordre qualitatif.

Une première étape est d'examiner l'évolution de la température totale, la pression totale et de la vitesse moyenne de l'écoulement le long du CRN. La Figure 2.7 donne une représentation normalisée de ces grandeurs dans la configuration décollage. Sur cette figure, les changements brusques de valeur observés pour la vitesse et la température entre deux zones de la chambre de combustion sont liés à l'apport d'air de dilution et de refroidissement. La pression totale constante dans la chambre est due quant à elle à l'hypothèse (2.13).

Concernant les évolutions des 3 grandeurs normalisées dans les modules postchambre, on remarque que celles-ci sont très similaires à celles présentées à la Figure 4.8 et obtenues par Lukachko et al. (1998) dans une autre turbine à gaz et sur cette partie du moteur. Cette même Figure 4.8 met également en avant que les temps de résidence des gaz brûlés calculés par le CRN au travers des modules postchambre sont globalement réalistes, que ce soit au décollage (Figure 4.7 et 4.9) ou dans les autres configurations (Figure 4.9).

De manière générale, les évolutions de la température, la pression et la vitesse observées dans les autres configurations (montée, approche et ralenti) sont quasiment identiques à celles de la configuration décollage sous cette représentation normalisée, à l'exception près que le temps de résidence augmente dans chacune des zones à mesure que la puissance diminue (étirement horizontal des courbes de température en fonction du temps de résidence illustré par la Figure 4.9).

L'évolution globale décroissante de la température le long du CRN à partir de la sortie de la zone primaire et mise en évidence sur la Figure 4.9 est en bon accord avec le type de chambre de combustion étudié (chambre du type « lean-burn combustor »). Une évolution assez similaire peut être observée pour ce type de chambre dans les travaux de Tietz et Behrendt (2011) et dans le CRN de Rezvani (2010).

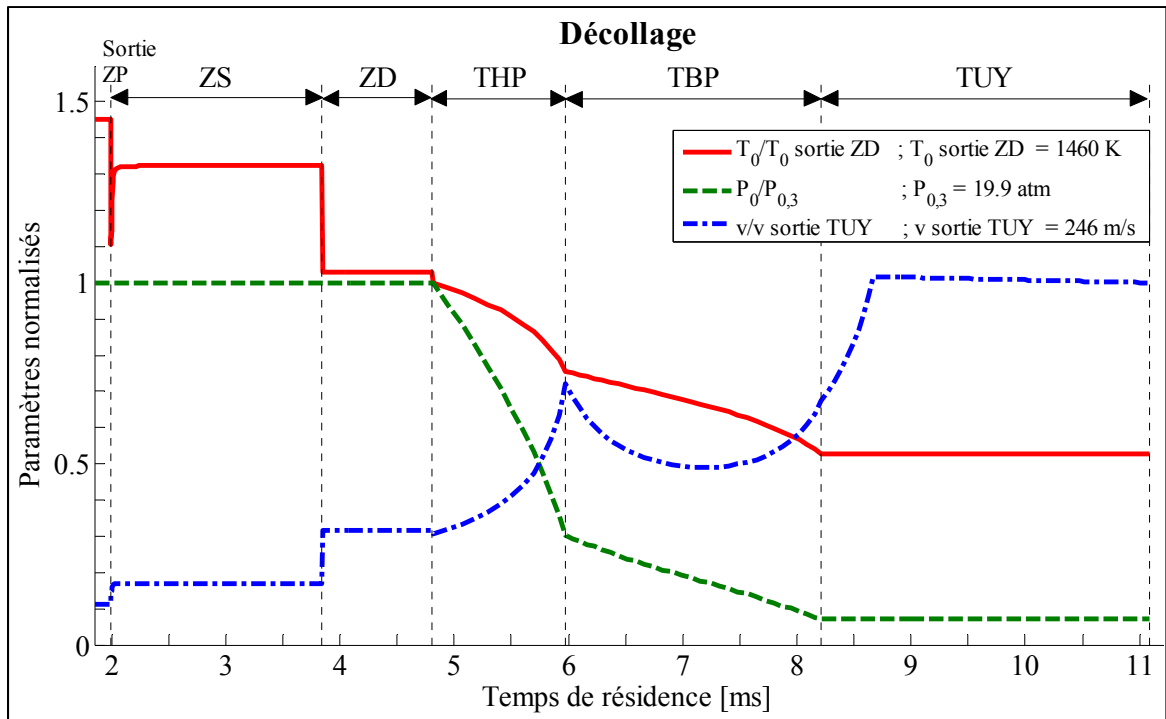
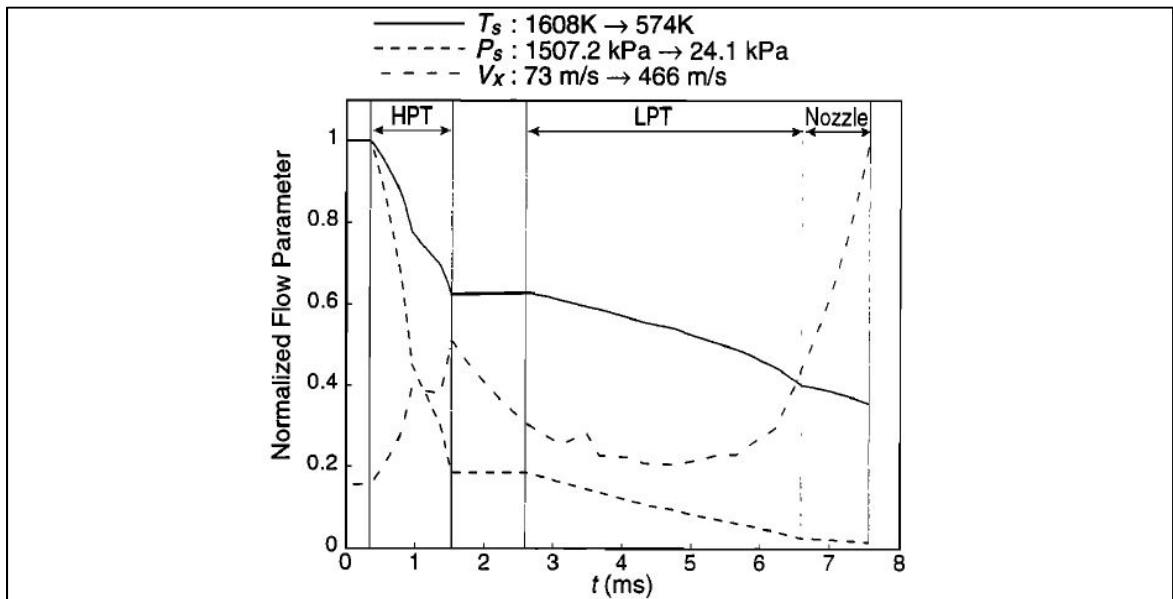


Figure 4.7 Profils normalisés de température totale, pression totale et vitesse en fonction du temps de résidence, configuration décollage



HPT = THP ; LPT = TBP ; Nozzle = TUY

Figure 4.8 Évolutions de la température, pression et vitesse normalisées au sein des modules postchambre de l'« Advance Subsonic Engine » (Turbofan) en vol croisière
Tirée de Lukachko et al. (1998, p. 16163)

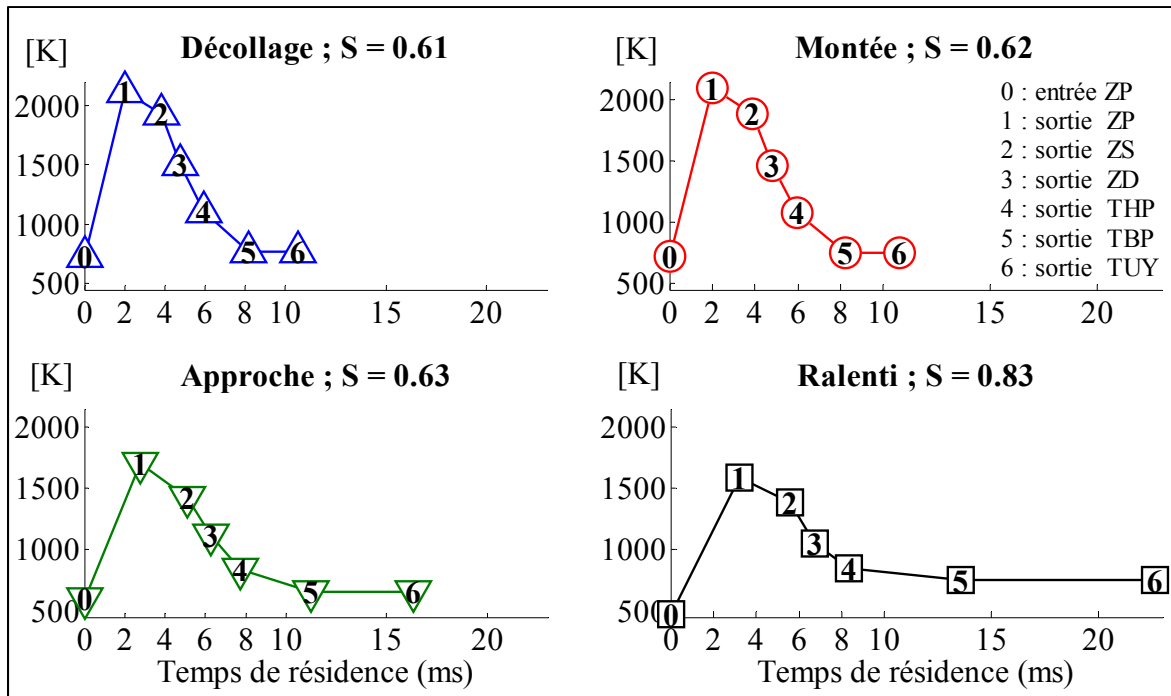


Figure 4.9 Évolution de la température et du temps de résidence des produits de combustion dans chaque zone du CRN, pour les quatre configurations étudiées

Pour ce qui est du temps de résidence des gaz brûlés au sein de la chambre de combustion (ZP + ZS + ZD), celui-ci est compris entre 4.8 ms (décollage) et 6.7 ms (ralenti) selon la configuration de vol et rejoint les remarques faites par Shakariyants (2008), Zakharov et al. (2009) et Lebedev (2009) selon lesquelles le temps de résidence des gaz dans une chambre de turbofan moderne est généralement compris entre 5 et 7 ms. Le temps de résidence moyen au sein de la zone primaire varie entre 2.0 ms (décollage) et 3.2 ms (ralenti). Ces valeurs concordent avec celles des études de Lebedev (2009) (temps de résidence calculer dans cette zone par CFD dans une chambre en configuration décollage : 1.8 ms) et le modèle de CRN à 2 réacteurs (1 PSR pour la zone primaire, 1 PFR pour la dilution) de Rizk et Mongia (1995) où le temps de résidence dans la zone primaire varie entre 2 et 2.5 ms pour ce modèle.

Au sujet des valeurs de température en sortie de chaque zone du CRN, on peut noter que :

- Les températures moyennes relevées en sortie des zones primaire ($T_{\text{moy_ZP}}$, Tableau 4.9) et secondaire ($T_{\text{moy_ZS}}$) ainsi que la température maximale atteinte dans la zone primaire ($T_{\text{max_ZP}}$) s'approchent des observations d'Odgers (1975) sur une configuration haut régime et bas régime d'une chambre de combustion aéronautique à une rangée d'injecteurs (Tableau 4.10). On peut remarquer que les températures calculées sont comprises dans les intervalles de températures définis par ces deux configurations extrêmes analysées par Odgers.

Tableau 4.9 Températures calculées par le modèle de CRN en sortie des zones primaire et secondaire

Configuration	Décollage $P_{0,3} = 20 \text{ atm}$; $T_{0,3} = 735 \text{ K}$; $\phi_{ZP} = 0.9$	Montée	Approche	Ralenti $P_{0,3} = 3.5 \text{ atm}$; $T_{0,3} = 476 \text{ K}$; $\phi_{ZP} = 0.55$
$T_{\text{moy_ZP}}$ [K]	2120	2090	1710	1590
$T_{\text{max_ZP}}$ [K]	2570	2560	2450	2320
$T_{\text{moy_ZS}}$ [K]	1930	1890	1420	1380

Tableau 4.10 Températures moyennes et maximales rencontrées dans la zone primaire et secondaire d'une chambre de combustion aéronautique
Tiré d'Odgers (1975, p. 1322)

Configuration	Haut régime $P_{0,3} = 25 \text{ atm}$; $T_{0,3} = 800 \text{ K}$; $\phi_{ZP} = 1.0$	Bas régime $P_{0,3} = 1.5 \text{ atm}$; $T_{0,3} = 300 \text{ K}$; $\phi_{ZP} = 0.5$
$T_{\text{moy_ZP}}$ [K]	2200	1100
$T_{\text{max_ZP}}$ [K]	2600	2300
$T_{\text{moy_ZS}}$ [K]	1900	950

- Les températures en sortie de chambre de combustion ($T_{\text{sortie_DZ}}$) calculées par le CRN et répertoriées dans le Tableau 4.11 concordent assez bien avec les données proposées par Lukachko et al. (2008) relatif à un turbofan de gamme de poussées égales à 100 kN (rappel : poussée nominale du CFM56-2C1 \sim 98 kN). On notera cependant une température calculée dans la configuration ralenti qui est relativement plus élevée avec le modèle développé dans ce mémoire.

Tableau 4.11 Températures calculées par le modèle de CRN
en sortie de chambre de combustion

Configuration	Décollage	Montée	Approche	Ralenti
$T_{\text{sortie_ZD}}$ [K] (mémoire)	1460 ($P_{03}=19.9$ atm)	1430 ($P_{03}=18.6$ atm)	1090 ($P_{03}=8.4$ atm)	1020 ($P_{03}=3.5$ atm)
$T_{\text{sortie_ZD}}$ [K] (Lukachko et al., 2008, pp. 021505-4)	1520 ($P_{03}=23$ atm)	1440 ($P_{03}=19$ atm)	1010 ($P_{03}=7.1$ atm)	840 ($P_{03}=3.3$ atm)

- À propos des valeurs de température calculées en sortie de tuyère ($T_{\text{sortie_TUY}}$, Tableau 4.12), les résultats obtenus sont quant à eux plus critiquables. La comparaison des valeurs calculées avec celles du rapport d'APEX-1 de Wey et al. (2006) montre un écart notable entre ces deux séries de températures qui s'accroît avec la puissance moteur. L'absence dans le modèle actuel des étages internes aux modules turbines et leur interaction sur la thermodynamique de l'écoulement conduit inévitablement à un écart sur les valeurs de température en sortie de moteur. D'autre part, il se pourrait également que l'hypothèse (4.2) faite sur les ratios de détente dans les turbines autres que ceux du décollage, voire même la valeur de base au décollage de l'ONERA, soient aussi à revoir (une surdétente pourrait amener un abaissement des températures trop important).

Tableau 4.12 Températures calculées par le modèle de CRN
dans le plan de sortie de la tuyère

Configuration	Décollage	Montée	Approche	Ralenti
$T_{\text{sortie_TUY}}$ [K] (mémoire)	770	760	660	750
$T_{\text{sortie_TUY}}$ [K] (Wey et al., 2006, p. 45)	1061	1029	775	754

4.5 Conclusion partielle

Dans ce chapitre, le modèle de CRN pour turbines à gaz proposé au chapitre 2 a fait l'objet d'une étape de calibration puis de validation, qui s'appuie sur les données de fonctionnement associées au turbofan CFM56-2C1 de l'étude expérimentale APEX-1 sur les émissions de particules aéronautiques (Wey et al., 2006).

L'étape de calibration s'est concentrée sur la définition du nombre de PSRs pour la zone primaire ainsi que celles du paramètre de mélange S pour chacune des configurations de vol étudiées. Lors de l'étude de validation, les résultats obtenus avec le modèle de CRN sur les concentrations en espèces chimiques et les grandeurs thermodynamiques en différents points du moteur sont dans l'ensemble satisfaisants, et ce, principalement dans les configurations moteur à forte puissance (décollage et montée). Bien que le modèle ne parvienne pas à reproduire avec exactitude les émissions de CO à forte puissance moteur, les bons résultats obtenus dans ce régime pour les émissions de NO_x, dont l'évolution en fonction de la puissance moteur tend à suivre celle des particules de suie, présument une calibration réaliste du modèle pour la suite de l'étude. Toutefois, les écarts plus importants observés au régime de ralenti sur les émissions de NO_x imposent une vigilance particulière pour cette configuration quant aux résultats à venir dans l'étude sur les suies.

Une attention devra également être portée sur l'impact des modules postchambre vis-à-vis des émissions de particules devant les valeurs de températures obtenues en sortie de moteur. Ces écarts avec les températures mesurées sont cependant à relativiser par rapport aux résultats plutôt satisfaisants obtenus pour les concentrations en précurseurs sulfatés de particules volatiles (SO₂ et valeurs du paramètre d'efficacité de conversion du soufre ϵ), particulièrement sensibles aux conditions thermodynamiques dans ces modules postchambre (Starik et al., 2002).

CHAPITRE 5

EXPLOITATION DU RÉSEAU DE RÉACTEURS CHIMIQUES POUR LA PRÉDICTION DES ÉMISSIONS DE PARTICULES DE SUIE

5.1 Paramétrage du module « Particle Tracking Feature » de CHEMKIN-PRO

Dans ce chapitre, les cinétiques de combustion du kérosène et de formation des PAHs en phase gazeuse, de formation et de croissance des particules par réaction de surface ainsi que le modèle dynamique de coagulation des particules sont désormais utilisés simultanément. La simulation de la coagulation et le calcul par la méthode des moments des propriétés de la population de particules produite sont réalisés par le module PARTICLE TRACKING FEATURE de CHEMKIN-PRO. L'utilisation de ce module requiert la définition de deux paramètres essentiels que sont :

- 1) la masse volumique des particules de suie, supposée égale dans ce mémoire à $\rho_s = 1.8 \text{ g/cm}^3$ (Kazakov et Frenklach, 1998) ;
- 2) le régime de transport (moléculaire, transition ou continu) associé au nombre de Knudsen Kn des particules de suie permettant de définir dans le solveur l'expression de la fréquence de collision appropriée.

Certaines suppositions doivent être faites pour l'évaluation de Kn le long du CRN.

- 1) Le gaz porteur peut être assimilé à du diazote N_2 , qui constitue à lui seul près de 75 % du mélange d'air frais et des gaz brûlés. Cette supposition implique dans l'expression de Kn (relation 3.6) que

$$d_g \approx d_{N_2} = 0.315 \text{ nm} . \quad (5.1)$$

- 2) Les deux configurations de puissance extrêmes seront étudiées, à savoir la phase de décollage et de ralenti. Pour chacune des configurations, on considèrera la valeur moyenne du diamètre D_p de la population de particules évaluée dans l'étude APEX-1 (Wey et al., 2006, p. V)

$$D_{p_Décollage} \approx 40 \text{ nm} \quad (5.2)$$

$$D_{p_Ralenti} \approx 15 \text{ nm}$$

Étant donné que la distribution de taille des particules a généralement un profil log-normale, cette valeur de Kn associée à la population globale de particules et basée sur son diamètre moyen représente une approximation raisonnable du régime de transport prédominant des particules.

On obtient ainsi à l'aide la relation (3.6) les valeurs présentées dans le Tableau 3.7 pour Kn dans les configurations décollage et ralenti au sein du moteur. L'analyse de ces valeurs montre que les configurations forte puissance (décollage et montée) sont plus proches d'un régime de transition ($Kn \approx 1$) contrairement aux configurations faible puissance (approche et ralenti) où le modèle de régime moléculaire ($Kn \gg 1$) reste approprié.

Tableau 5.1 Évaluation du nombre de Knudsen Kn dans le CRN au décollage et au ralenti

Configuration	Décollage ($D_p \approx 40$ nm)			Ralenti ($D_p \approx 15$ nm)		
	Sortie ZP	Sortie CC	Sortie TUY	Sortie ZP	Sortie CC	Sortie TUY
T_0 [K]	2120	1460	770	1590	1020	750
P_0 [Pa]	2.0E6	2.0E6	1.4 E5	3.5E5	3.5E5	1.0E5
Kn	1.7	1.1	8.6	19.0	12.2	30.2

Un régime de transition a donc été sélectionné pour les configurations décollage et montée alors que le régime moléculaire a été choisi pour les configurations approche et ralenti. Le module PARTICLE TRACKING FEATURE du logiciel CHEMKIN-PRO sélectionne automatiquement par la suite le coefficient de collision β défini en ANNEXE III associé au régime choisi.

5.2 Prédiction des émissions de particules de suie par le CRN

Cette partie du mémoire présente les résultats de simulation sur les indices d'émissions en masse et en nombre de particules suies ainsi que leur diamètre moyen en sortie de moteur

obtenus avec le mécanisme pour particules couplé au CRN. Ces résultats seront analysés conjointement aux données expérimentales de l'étude APEX-1.

5.2.1 Données expérimentales de comparaison

Les calculs d'émissions de particules au travers du CRN s'appuient sur les mêmes cas tests de l'étude expérimentale APEX-1 définis au chapitre 4 (Tests n°859, 860, 902 et 903). Pour chacun d'entre eux, le rapport de Wey et al. (2006) fournit les indices d'émissions massiques ($EIm-exp$), de nombre de particules ($EIn-exp$) et le diamètre moyen (géométrique) de la population totale de particules (D_p-exp). Ces données qui figurent également dans le Tableau 5.2 ont été mesurées à 1 m du plan de sortie du moteur et sont associées au carburant du type « high aromatic » (21.6 % d'aromatiques). Dans ce même tableau seront également indiquées les plages de valeurs mesurées pour $EIm-exp$, $EIn-exp$ et D_p-exp dans d'autres tests similaires (c.-à-d.. à une même configuration moteur, type de carburant et distance de mesure par rapport au plan de sortie).

5.2.2 Résultats associés aux valeurs calibrées du paramètre de mélange « S »

Le Tableau 5.2 ci-après présente pour chaque configuration les valeurs d' $EIn-num$, $EIm-num$ et D_p-num calculées par le CRN avec la version du sous-mécanisme de croissance HACA-Kazakov (résultats en rouge dans le Tableau 5.2).

Une première lecture des résultats répertoriés dans ce tableau met en évidence une surestimation par le modèle des émissions massiques de suies $EIm-num$ par rapport aux données expérimentales, qui peut aller d'un à deux ordres de grandeur selon la configuration. Cette surestimation est liée à des diamètres moyens de particules D_p-num trop importants (jusqu'à 5 fois supérieurs aux valeurs mesurées). Sachant que les émissions massiques sont calculées sur la base du volume occupé par les particules et de la donnée de leur masse volumique, on comprend alors l'impact qu'ont des diamètres trop élevés sur la valeur d' $EIm-num$ (le diamètre étant élevé au cube dans le calcul du volume de la particule).

Tableau 5.2 Indices d'émissions et diamètre moyen des particules en sortie de moteur
calculés par le modèle de CRN
(valeurs expérimentales tirées de Wey et al., 2006, p.243)

Configuration	Décollage	Montée	Approche	Ralenti
<i>S-calib</i>	0.61	0.62	0.63	0.83
Numéro du test expérimental	n°902	n°903	n°859	n°860
<i>EIn-num</i> [# /kg-fuel] HACA-Kazakov	1.73E15	1.70E15	7.12E14	9.59E15
<i>EIn-num</i> [# /kg-fuel] HACA-Kazakov modifié (a)	1.81E16	1.79E16	9.89E14	3.76E16
<i>EIn-exp</i> [# /kg-fuel] Autres tests expérimentaux similaires (b)	2.7E15 [8.6E14 ; 2.7E15]	2.6E15 [6.7E14 ; 2.6E15]	1.8E15 [2.3E14 ; 1.8E15]	1.3E15 [9.5E13 ; 1.3E15]
<i>D_p-num</i> [nm] HACA-Kazakov	175	167	38	44
<i>D_p-num</i> [nm] HACA-Kazakov modifié	39	38	19	20
<i>D_p-exp</i> [nm] Autres tests expérimentaux similaires	35 [33 ; 51]	33 [31 ; 46]	16 [16 ; 28]	15 [15 ; 18]
<i>Elm-num</i> [mg/kg-fuel] HACA-Kazakov	8738	7507	38	775
<i>Elm-num</i> [mg/kg-fuel] HACA-Kazakov modifié	1039	968	6	304
<i>Elm-exp</i> [mg/kg-fuel] Autres tests expérimentaux similaires	257 [111 ; 257]	204 [87 ; 204]	7 [3 ; 7]	4 [1 ; 4]

(a) Résultats obtenus en divisant par 100 le facteur préexponentiel « A » de chaque réaction du sous-mécanisme HACA-Kazakov original (Tableau 3.4).

(b) Mesures effectuées à 1m du plan de sortie du moteur et associées au carburant du type « high aromatic ».

Malgré des valeurs d'*EIn-num* pour les configurations approche jusqu'à celle de décollage qui sont comprises dans l'intervalle des valeurs mesurées pour d'autres tests expérimentaux similaires, la validité de ces résultats devant les valeurs obtenues pour *D_p-num* ne peut être confirmée. En effet, des particules plus grosses sous-entendent que plusieurs d'entre elles ont

soit coagulées ensemble, soit que des espèces intervenant dans la croissance simultanée des PAHs et des particules ont moins contribué à la formation des PAHs, ce qui a pour effet indirect de réduire le nombre de réactions de nucléation. Dans tous les cas, ces deux phénomènes réduisent la concentration en nombre de particules. La spécificité du cas de ralenti quant à lui ne peut être entièrement expliquée à priori par les remarques faites sur $D_p\text{-num}$ et nécessite une analyse approfondie de cette configuration. On observe d'ailleurs dans cette configuration une surestimation par le modèle des trois paramètres étudiés.

Devant ces résultats, une première étape d'analyse a été d'étudier les variations de $D_p\text{-num}$ en fonction du paramètre de mélange S , dans l'hypothèse d'une erreur sur les valeurs calibrées $S\text{-calib}$ (rappelées au Tableau 5.2). Cette étude a révélé que les valeurs de $D_p\text{-num}$ en fonction de S sont dans l'ensemble très supérieures aux données expérimentales et que dans le cas des configurations forte puissance, aucune des valeurs de S ne permet d'obtenir des diamètres dans la gamme de ceux mesurés.

Si on revient désormais aux valeurs spécifiques de S dans chacune des configurations, on constate également en analysant l'évolution du diamètre moyen de la population de particules le long du CRN tel qu'illustré à la Figure 5.1 (configuration décollage) que celui-ci possède une dimension excessive dès la sortie de la zone primaire.

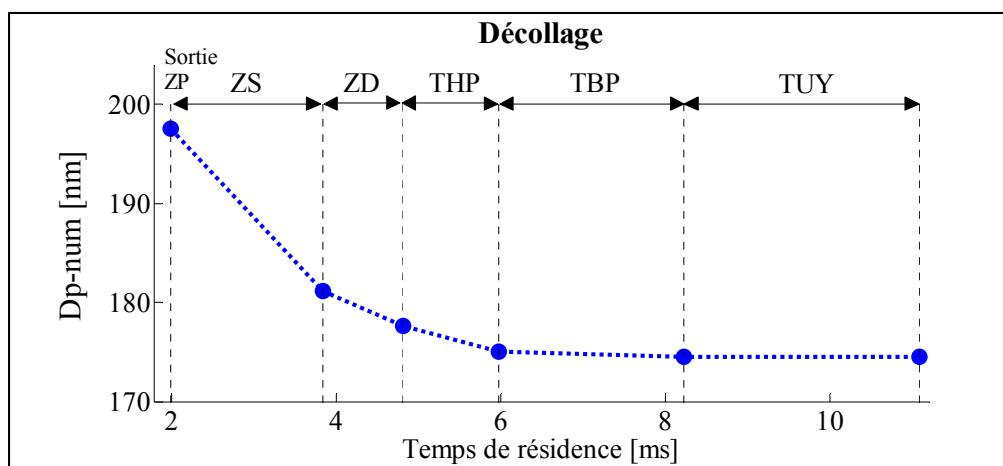


Figure 5.1 Évolution du diamètre moyen des particules de suie $D_p\text{-num}$ le long du CRN (configuration décollage, mécanisme HACA-Kazakov)

Cette dernière observation amène donc à s'interroger dans une seconde étape sur le mécanisme de formation des particules et particulièrement les sous-mécanismes de croissance. Pour ce faire, une étude de sensibilité sur les réactions de croissance des particules a été conduite dans le PSR de la zone primaire ayant la production massique de suies la plus significative, dont les résultats sont présentés à la Figure 5.2. L'histogramme supérieur de la Figure 5.2 met en évidence que la réaction de croissance des particules par ajout d'acétylène (C_2H_2) du sous-mécanisme HACA-Kazakov a une contribution excessive devant celles par condensation des PAHs. Ces résultats semblent s'éloigner des observations de Marr et al. (1994), Wen et al. (2005) ou encore Zhang et al. (2009), où ces derniers mentionnent une contribution de la condensation des PAHs égale, voire supérieure à celle du mécanisme de croissance par acétylène (pour des flammes riches à haute température, de diffusion ou au sein d'un PFR).

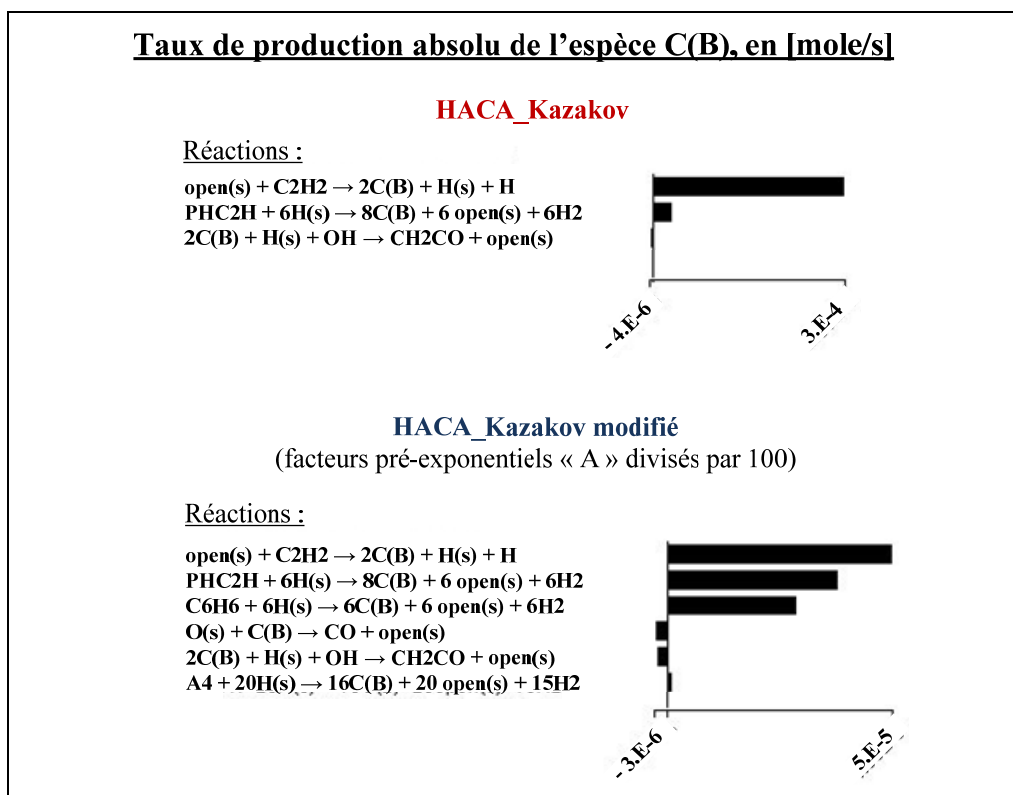


Figure 5.2 Analyse de sensibilité sur le mécanisme de réactions de surface pour particules, dans le PSR de la zone primaire avec Elm maximal

Un ajustement des constantes de vitesse de réaction du Tableau 3.4 pour le sous-mécanisme HACA-Kazakov a donc été opéré. Le facteur préexponentiel « A » des quatre réactions composant ce sous-mécanisme a été divisé par un facteur **100** à titre d'étude. Cette modification permet de donner un poids plus significatif aux réactions de condensation des PAHs, comme l'illustre l'histogramme inférieur de la Figure 5.2, qui est plus en accord avec les remarques de Marr et al. (1994), Wen et al. (2005) ou encore Zhang et al. (2009).

Les valeurs d'*EIn-num*, *EIm-num* et *Dp-num* dans chacune des configurations moteur ont été recalculées avec ce sous-mécanisme HACA-Kazakov modifié et sont présentées dans le Tableau 5.2 (résultats figurant en bleu). L'examen de ces nouvelles valeurs montre une nette amélioration d'*EIm-num*, principalement due à une réduction significative du diamètre moyen des particules *Dp-num* qui sont désormais dans l'intervalle des valeurs observées expérimentalement. En excluant le cas du ralenti, on peut remarquer aussi que les évolutions des trois paramètres calculés en fonction de la puissance moteur respectent les tendances expérimentales observées (croissance des trois paramètres avec la puissance moteur).

Cependant, il apparaît que la diminution de *Dp-num* ne suffit pas à obtenir des valeurs d'*EIm-num* qui soient correctes (excepté dans le cas de l'approche). Cet écart s'explique par une augmentation du nombre de particules produites suite à la modification apportée au mécanisme HACA-Kazakov. L'accroissement d'*EIn-num* observé peut atteindre jusqu'à 10 fois les valeurs calculées avec le mécanisme original et il apparaît alors que les résultats satisfaisants pour *EIn-num* avec le mécanisme original étaient bien la conséquence des dimensions excessives des particules. Ce résultat met en avant l'existence d'un couplage entre le nombre de particules produites et leur dimension.

Il apparaît également que le mécanisme HACA-Kazakov modifié n'apporte pas d'améliorations quant aux prédictions obtenues à la Figure 3.2 dans le test du JSR/PFR (on a même une diminution de la concentration massique de suies en sortie de PFR à une valeur de $0.55\text{E-}7 \text{ g/cm}^3$). Ce contraste entre la surproduction massique de suies observée dans le cas du CRN pour turbine à gaz et la sous-production constatée dans le cas du test JSR/PFR avec

les deux sous-mécanismes HACA-Kazakov (original ou modifié) souligne une influence marquée des cinétiques de combustion (kérosène dans le cas du CRN et éthylène dans le cas du JSR/PFR) et de formation des PAHs sur les prédictions en émissions de suies (possibilité d'une surproduction de PAHs par la cinétique kérosène-PAHs).

Afin de compléter l'analyse des résultats du Tableau 5.2, une étude des évolutions d' $EIm-num$, $EIn-num$ et D_p-num en fonction du paramètre de mélange S dans la partie suivante a été menée. Les résultats obtenus avec le sous-mécanisme HACA-Kazakov modifié étant ceux qui s'approchent au mieux des résultats expérimentaux (du moins sur les diamètres et des émissions massiques), il a été décidé de poursuivre l'ensemble des études menées dans ce chapitre avec ce sous-mécanisme.

5.3 Analyse d' $EIm-num$, $EIn-num$ et D_p en fonction de « S »

Les évolutions des trois paramètres $EIn-num$, $EIm-num$ et D_p-num en fonction de S avec le sous mécanisme HACA-Kazakov modifié sont représentées respectivement par les Figures 5.3, 5.4 et 5.5. (courbes continues). Sur ces figures, les résultats spécifiques obtenus pour les valeurs calibrées du paramètre de mélange ($S-calib$) sont spécifiés par un symbole. Sur chaque graphique sont également indiquées les valeurs minimales et maximales d' $EIm-exp$, $EIn-exp$ et D_p-exp obtenues lors de l'étude expérimentale APEX-1 (barre en pointillé rouge), dans le cas d'un carburant du type « high aromatic » et pour une mesure effectuée à 1m du plan de sortie du moteur. Deux remarques doivent être apportées avant d'examiner ces trois figures. La première concerne la similarité entre les résultats « montée » et ceux « décollage » aussi bien du point de vue des évolutions des trois paramètres étudiés que de leurs valeurs. Pour cette raison, les résultats de la configuration décollage sont les seuls illustrés. La deuxième remarque se rapporte au nombre de PSR pour la zone primaire. Celui-ci a été maintenu à $n = 135$ dans chaque configuration. Une étude sensibilité sur $EIm-num$, $EIn-num$ et D_p-num en fonction de n a montré que les variations sur les trois paramètres avec n sont $< 4 \%$ pour $n = 135$, et ce, quelle que soit la valeur de S .

Une première analyse d'ensemble des Figures 5.3, 5.4 et 5.5 met en avant l'inexistence de résultats en deçà d'une certaine valeur du paramètre S (~ 0.4 à forte puissance et ~ 0.5 à faible puissance). Ceci tient au fait que le modèle ne génère pas de particules de suie pour des richesses < 1.5 à faible puissance et < 1.7 à forte puissance dans les PSRs de la zone primaire. Ces seuils de richesse pour l'apparition de suies sont en accord avec la valeur seuil de 1.5 mentionnée par Kiameh (2003) et Martini (2008). Or pour les faibles valeurs de S , il s'avère que la richesse maximale dans les PSRs de la zone primaire est inférieure à ces valeurs seuil. Toujours d'un point de vue général, on distingue également une évolution croissante des trois paramètres $EIn-num$, $Elm-num$ et $Dp-num$ à mesure que S croît. Dans le cas d' $Elm-num$ (Figure 5.5), cette croissance en fonction de S s'explique simplement par l'existence de plus fortes valeurs de richesses locales dans la zone primaire à mesure que S augmente, favorisant ainsi la production de suies. Une telle évolution a pu être mise en évidence avec le CRN de Martini (2008) sur l'ensemble des configurations de vol analysées par cet auteur.

Le seul cas d'exception à cette croissance globale des trois paramètres avec S concerne la courbe d' $EIn-num$ dans la configuration ralenti (Figure 5.3 ci-dessous), où une décroissance du nombre de particules puis une réaugmentation autour d'une valeur de $S \sim 0.7$ est observée. Cette allure est en partie due aux conditions de températures dans la zone primaire et secondaire relativement basses pour $0.5 < S < 0.7$ (Figure 4.5), qui influe sur la coagulation des particules et favorise la production d'un grand nombre de petites particules observé pour $S < 0.7$ sur les Figures 5.3 ($EIn-num$) et 5.4 ($Dp-num$).

Globalement, les remarques faites au sujet des valeurs d' $EIn-num$ et $Dp-num$ au Tableau 5.2 dans le cas du sous-mécanisme HACA-Kazakov modifié se retrouvent dans l'analyse de leur évolution en fonction de S (Figures 5.3 et 5.4). Bien que les valeurs de $Dp-num$ soient relativement proches des mesures expérimentales (Figure 5.4), il n'en reste pas moins que la modification sur le sous-mécanisme HACA-Kazakov conduit dans l'ensemble à une surproduction de particules, et ce, sur une large plage de valeurs de S comme illustré à la Figure 5.3.

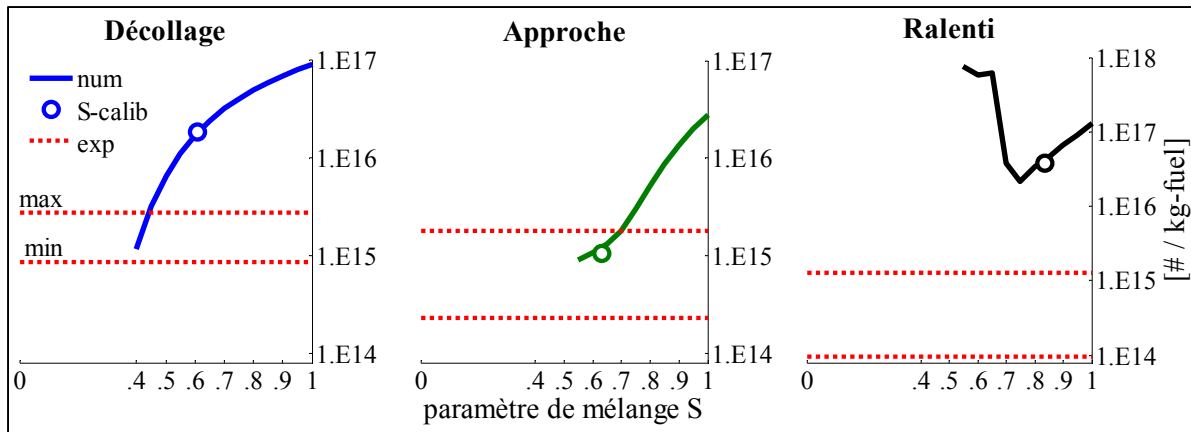


Figure 5.3 Évolution de l'indice d'émissions en nombre de particules $EIn-num$ en fonction du paramètre de mélange S (mécanisme HACA-Kazalov modifié)

Ce résultat met en avant la difficulté d'obtenir simultanément le bon nombre de particules au bon diamètre en ajustant seulement les sous-mécanismes de croissance individuelle des particules ; ceci étant dû au couplage évoqué entre le nombre de particules et leur dimension individuelle. Ce résultat souligne l'existence possible en amont d'autres problématiques associées au mécanisme de formation des particules (réaction de nucléation unique ; pas de modèle d'agrégation des particules ; calibration de la cinétique à faible pression et sur des carburants faiblement aromatisés), voire même des précurseurs de particules (surproduction de PAHs).

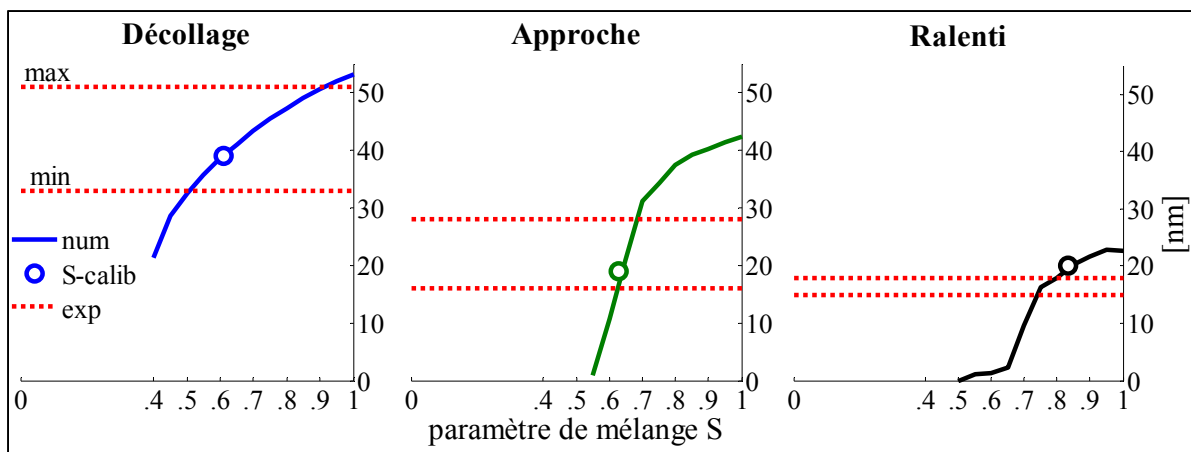


Figure 5.4 Évolution du diamètre moyen des particules de suie D_p-num en fonction du paramètre de mélange S (mécanisme HACA-Kazalov modifié)

L'analyse de la courbe d' $Elm-num$ en fonction de S pour le décollage (Figure 5.5) et plus généralement dans les configurations forte puissance, peut soulever également l'idée d'une incertitude sur la valeur de S calibrée, qui serait liée aux nombreuses hypothèses faites sur le modèle de CRN développé dans ce mémoire. On constate en effet que les valeurs de S dans ces configurations tendent à surestimer les émissions de suies et qu'une valeur plus faible ($S \sim 0.5$), mais sans pour autant trop éloignée des valeurs calibrées dans ce mémoire ($S_{calib\ décollage} = 0.61$), pourrait conduire à des résultats pour les trois paramètres relativement proches de ceux obtenus expérimentalement. Ce constat suggère la mise en place d'une étude de sensibilité sur la valeur de S calibrée en fonction de certains paramètres du CRN, pour lesquels des incertitudes sur leur valeur existent.

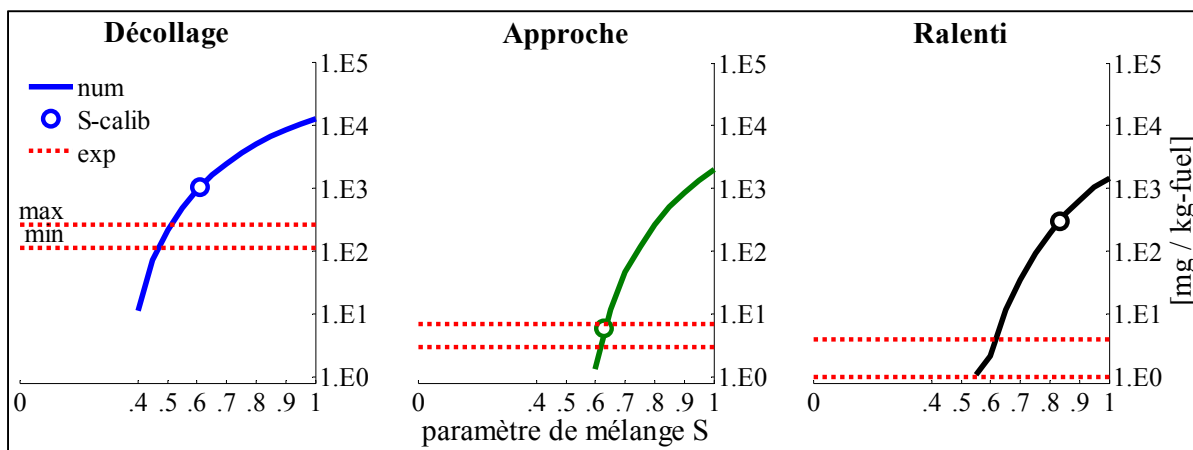


Figure 5.5 Évolution de l'indice d'émissions massiques $Elm-num$ en fonction du paramètre de mélange S (mécanisme HACA-Kazalov modifié)

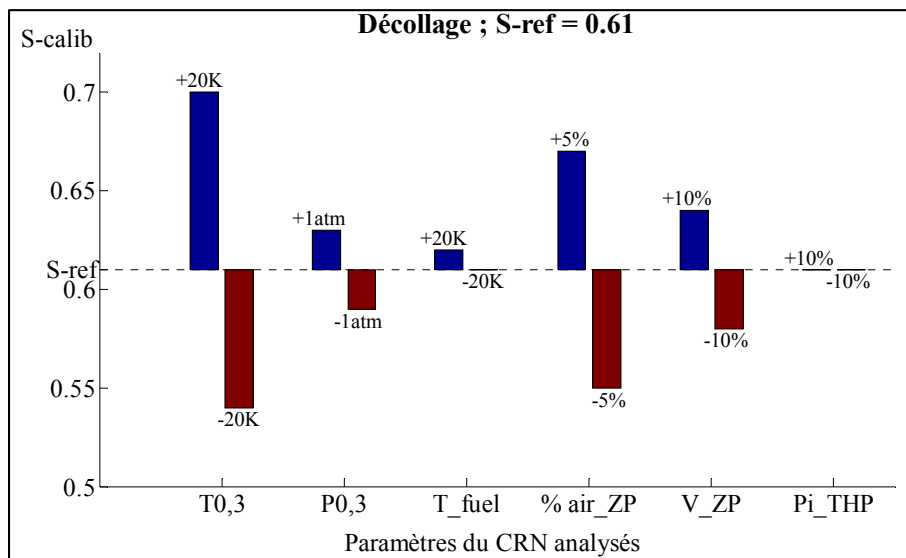
5.4 Analyse de sensibilité sur la calibration du paramètre de mélange « S »

L'analyse des résultats sur $Elm-num$ en fonction de S à la Figure 5.5 a souligné la possibilité d'une erreur sur la valeur calibrée de S , notamment dans le cas des régimes de forte puissance. La valeur de S obtenue dans chaque configuration par la méthode de calibration développée à la partie 4.2.2 s'appuie sur les valeurs d' $EINO_x-num$ et $EICO-num$ calculées, elles-mêmes dépendantes des conditions thermodynamiques, de richesse et de temps de résidence des gaz brûlés dans chacune des zones du moteur. Or, le manque de données

complètes sur les conditions d'opération du moteur étudié on conduit à émettre certaines hypothèses sur des paramètres d'entrée du CRN. Six paramètres majeurs du CRN pour lesquels des incertitudes subsistent ont été considérés. Il s'agit de :

- 1) la température totale en entrée de chambre de combustion $T_{0,3}$ (pour tenir compte des incertitudes sur la valeur du rendement de compression isentropique η_c et sur le ratio des chaleurs spécifiques γ supposés en ANNEXE V),
- 2) la pression totale en entrée de chambre de combustion $P_{0,3}$,
- 3) la température du carburant injecté dans la chambre de combustion T_{fuel} ,
- 4) le pourcentage du débit d'air total alloué à la zone primaire % air_ZP (influe sur la richesse moyenne de la zone primaire),
- 5) le volume de la zone primaire V_ZP (influe sur le temps de résidence des gaz dans cette zone),
- 6) le ratio de détente des gaz dans la turbine haute pression Π_{THP} .

L'analyse de sensibilité porte sur la variation de la valeur de S calibrée (S_{calib}) dans le cas de la configuration décollage par rapport à la valeur initiale de référence (S_{ref}), en fonction d'une perturbation imposée individuellement à chacun des six paramètres étudiés. Les perturbations imposées à chaque paramètre par rapport à leur valeur originale sont définies directement sur la Figure 5.6, sur laquelle sont représentés les écarts entre la valeur calibrée de référence S_{ref} et celles obtenues après application de la perturbation.



Remarque : les sommes % air_ZP + % air_ZS et V_ZP + V_ZS ont été maintenues constantes.

Figure 5.6 Analyse de sensibilité sur la valeur de S calibrée (S_{calib})

Les résultats présentés sur la Figure 5.6 montrent une influence marquée de la température en entrée de chambre de combustion $T_{0,3}$ et du pourcentage d'air total alloué à la zone primaire $\% \text{ air_ZP}$ sur la valeur du paramètre S calibrée. En effet, l'analyse des résultats montre qu'une erreur de 5 % sur $\% \text{ air_ZP}$ ou de 20 K sur $T_{0,3}$ amène une variation allant de 10 à 15 % sur la valeur calibrée de S par rapport à celle de référence. On remarque aussi que l'ordre de grandeur des perturbations imposées sur ces deux paramètres peut conduire (dans le cas d'une perturbation négative) à des valeurs de S calibrées ($S\text{-calib} \sim 0.5$) permettant d'obtenir des valeurs d' $Elm\text{-num}$ au décollage relativement proche de celles mesurées expérimentalement (Figure 5.5). Concernant les autres paramètres étudiés, les perturbations imposées ont une influence relativement plus modeste sur cette configuration de vol, voire non significative (cas de T_{fuel} et du ratio de détente dans la turbine haute pression Π_{THP}).

5.5 Évolution des particules de suie et des espèces précurseurs le long du CRN

Les parties précédentes se sont intéressées essentiellement aux résultats donnés par le CRN en sortie de moteur. Il convient qu'une analyse plus affinée de ces résultats doit se pencher également sur les évolutions des particules de suie et des espèces intervenant dans leur formation le long du CRN.

5.5.1 Analyse des propriétés de la population de particules le long du CRN

Cette analyse s'intéresse dans un premier temps à un des points d'étude soulevés au chapitre 4 concernant l'influence des modules postchambre sur les propriétés de la population de particules. La Figure 5.7 ci-après représente l'évolution du diamètre moyen des particules $Dp\text{-num}$ le long du CRN dans le cas de la configuration décollage. La décroissance observée du diamètre est due aux mécanismes d'oxydation des particules, principalement par OH dans le début de la zone secondaire, puis majoritairement par O_2 dans le reste de la région postflamme. On observe aussi que les dimensions finales de la particule sont quasiment atteintes dès la sortie de la turbine haute pression (THP) et qu'au-delà les évolutions sont relativement figées. Un constat similaire peut être observé dans les travaux de Moniruzzaman

et Yu (2012). Il apparaît également que la contribution de la turbine haute pression dans l'oxydation des particules reste relativement modeste devant celle des zones de la chambre de combustion.

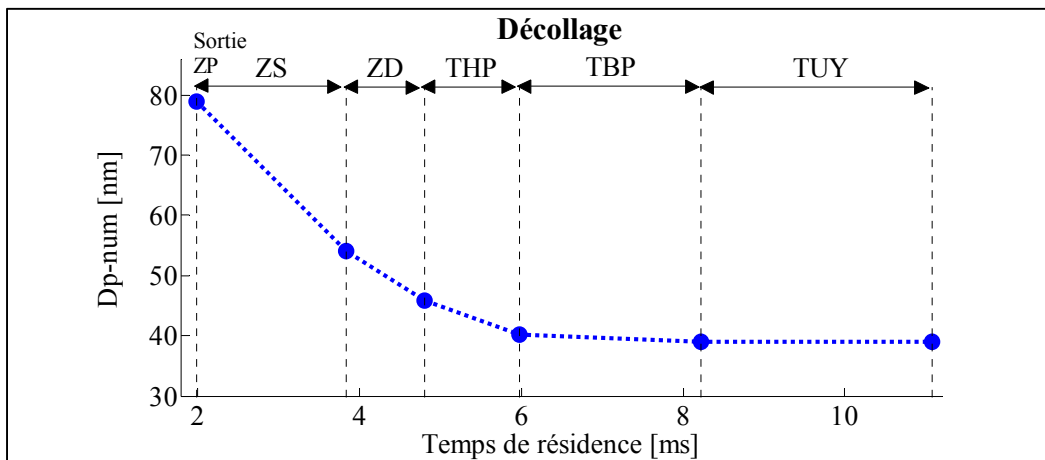


Figure 5.7 Évolution du diamètre moyen des particules de suie D_{p-num} le long du CRN (configuration décollage ; mécanisme HACA-Kazakov modifié)

Au sujet de l'évolution d' $EIn-num$ le long du CRN, celle-ci n'a pas été représentée, car les résultats montrent que le nombre de particules ne décroît que faiblement entre la sortie de la zone primaire et la sortie du moteur, quelle que soit la configuration de vol étudiée. Ce constat combiné aux remarques précédentes sur la part des modules postchambre dans l'évolution des diamètres des particules permet premièrement de dire que ces modules ont une influence limitée sur les caractéristiques de la population de particules au sein du CRN. Les problématiques sur la thermodynamique de ces modules mises en évidence au chapitre 4 ne peuvent à elles seules expliquer les résultats obtenus pour les trois paramètres de la population de particules calculés. Dans un second temps, il est à mentionner que cette faible décroissance d' $EIn-num$ tout au long du CRN appuie l'idée selon laquelle le mécanisme de formation des particules employé comporte certaines faiblesses liées au mécanisme de nucléation (une seule réaction) et à la non-prise en compte d'un modèle d'agrégation des particules.

5.5.2 Analyse des concentrations en espèces précurseurs le long du CRN

Les évolutions de six espèces clés dans le modèle de formation des particules de suie, à savoir : OH, H₂, C₂H₂, C₆H₆, A₄ (pyrène) et PHC₂H (phénylacétylène) ont été étudiées dans cette dernière section du mémoire. Il s'agit ici de déterminer si les évolutions de ces espèces dans le CRN peuvent avoir un impact sur les propriétés des particules. Les valeurs de leur fraction molaire en sortie de chacune des zones du CRN sont présentées sur la Figure 5.8, pour la configuration décollage. L'analyse de cette Figure 5.8 met en évidence une décroissance globale des six espèces le long du CRN. On constate également une évolution de la concentration de ces espèces relativement faible au-delà de la turbine haute pression (THP), qui se retrouve dans les études de Starik et al. (2002) et Lukachko et al. (1998) pour OH et H₂ ainsi que dans celle de Moniruzamann et Yu (2012) pour le C₂H₂ et le C₆H₆ (les autres aromatiques n'ayant pas été étudiés).

Les molécules OH et H₂, encore présentes à des concentrations significatives en sortie de zone primaire (plusieurs milliers de ppm), voient leur concentration diminuer progressivement à mesure que les dilutions successives s'opèrent dans la chambre de combustion. C'est d'ailleurs cette décroissance de la concentration en radical OH à partir de la zone secondaire et l'apport successif d'air de dilution qui favorisent ultérieurement la voie d'oxydation des suies par O₂ en fin de chambre de combustion et dans les modules postchambre.

Si on s'intéresse désormais aux fractions molaires du C₂H₂ et des aromatiques représentés sur la Figure 5.8, on relève pour ces espèces une chute de leur concentration au travers de la zone secondaire. Il apparaît que cette zone oxyde significativement ces espèces jusqu'à des seuils de concentration quasiment négligeables ($< 10^{-4}$ ppm). Dans le cas du C₂H₂ par exemple, la comparaison des résultats du CRN sur les indices d'émissions de cette espèce présentés dans le Tableau 5.3 par rapport à ceux mesurés dans l'étude APEX-1 souligne une sous-estimation de ces indices par le modèle, particulièrement à forte puissance moteur. Le CRN parvient néanmoins à évaluer l'ordre de grandeur des indices d'émissions en C₂H₂ dans le cas des

faibles puissances moteur. Cette analyse sur le cas particulier du C_2H_2 peut être étendue à d'autres espèces minoritaires (C_2H_4 , C_3H_6 , C_6H_6 , Naphtalène) mesurées dans l'étude APEX-1. Ce constat sur la sous-estimation par le modèle des concentrations en hydrocarbures aliphatiques et aromatiques imbrûlés, auquel s'ajoutent les variations des concentrations observées sur la Figure 5.8 dans la zone secondaire, incite à s'intéresser plus en détail à l'oxydation de ces composés dans cette zone.

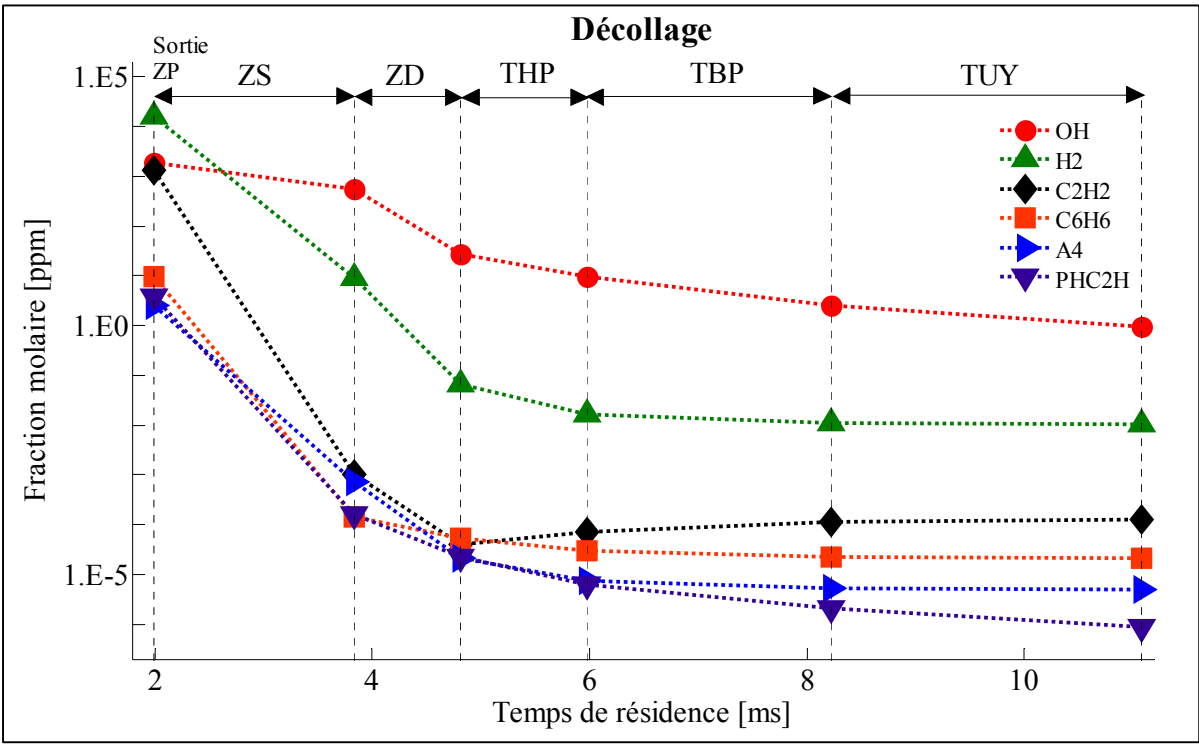


Figure 5.8 Évolution le long du CRN de la fraction molaire d'espèces chimiques intervenant dans le modèle de formation des suies (configuration décollage)

Tableau 5.3 Indice d'émissions de l'acétylène (EIC_2H_2) calculé par le modèle de CRN en sortie de moteur (valeurs APEX-1 tirées de Wey et al., 2006, p. 92 et 93)

Configuration	Référence	Décollage (n°902)	Montée (n°903)	Approche (n°859)	Ralenti (n°860)
EIC_2H_2 [g/kg-fuel]	Mémoire	5.6E-6	1.2E-5	2.3E-3	1.1E-2
	APEX-1	3.0E-2	2.9E-2	2.5E-2	8.6E-2

Pour ce faire, une analyse du profil de température le long du PFR modélisant la zone secondaire a été menée. Ce profil de température est donné par le graphique de gauche sur la Figure 5.9. Le premier constat qui peut être fait sur ce graphique est la présence d'un saut de température de près de 300K dès le début du PFR. La présence de ce saut de température sur une aussi courte distance apparaît comme peu probable dans une chambre de combustion réelle. Ce résultat s'explique par la présence en sortie de la zone primaire d'espèces combustibles telles que H_2 , CH_4 , C_2H_2 , C_2H_4 ou encore CO à des concentrations molaires significatives (de l'ordre de 10^3 à 10^4 ppm dans le cas du décollage) qui réagissent par la suite avec le premier apport d'air de dilution présent en excès. Ces espèces combustibles sont dues à l'excès de carburant dans les PSRs de la zone primaire ayant une richesse supérieure à 1 (soit près de la moitié des PSRs dans le cas du décollage). Le saut de température observé n'est pas anormal devant les concentrations en espèces combustibles relevées en entrée de PFR. Il souligne plutôt une limitation dans la modélisation de la zone secondaire par un unique PFR et du processus de dilution par un mélangeur inerte (solution 1 sur la Figure 5.9).

Une solution alternative composée d'un PSR en substitution du mélangeur inerte a été évaluée comme modèle pour la dilution en amont de la zone secondaire (solution 2 sur la Figure 5.9). Dans ce modèle, 10% du volume initial du PFR de la zone secondaire a été attribué au PSR. Sur le graphique de droite de la Figure 5.9 donnant l'évolution de la température le long du PFR, on relève désormais un saut de température en début de PFR bien moins significatif (~ 20 K). Cette réduction est liée à la possibilité accordée aux réactions de combustion de s'opérer dans le PSR, contrairement au cas du mélangeur inerte (cf. sur la Figure 5.9 la température en sortie du PSR par rapport au cas du mélangeur). On remarque par ailleurs que la température finale en sortie de PFR est quasiment identique au modèle précédent et il est à mentionner que ce nouvel arrangement de réacteurs n'a pas eu de répercussions sur les émissions de CO et NO_x calculées par le CRN. Bien que cette modélisation PSR-PFR permette d'obtenir une transition de température plus réaliste dans la zone secondaire, cette modification n'a cependant pas amené d'améliorations du point de vue des concentrations en C_2H_2 et en aromatiques, qui continuent à chuter au passage de la zone secondaire.

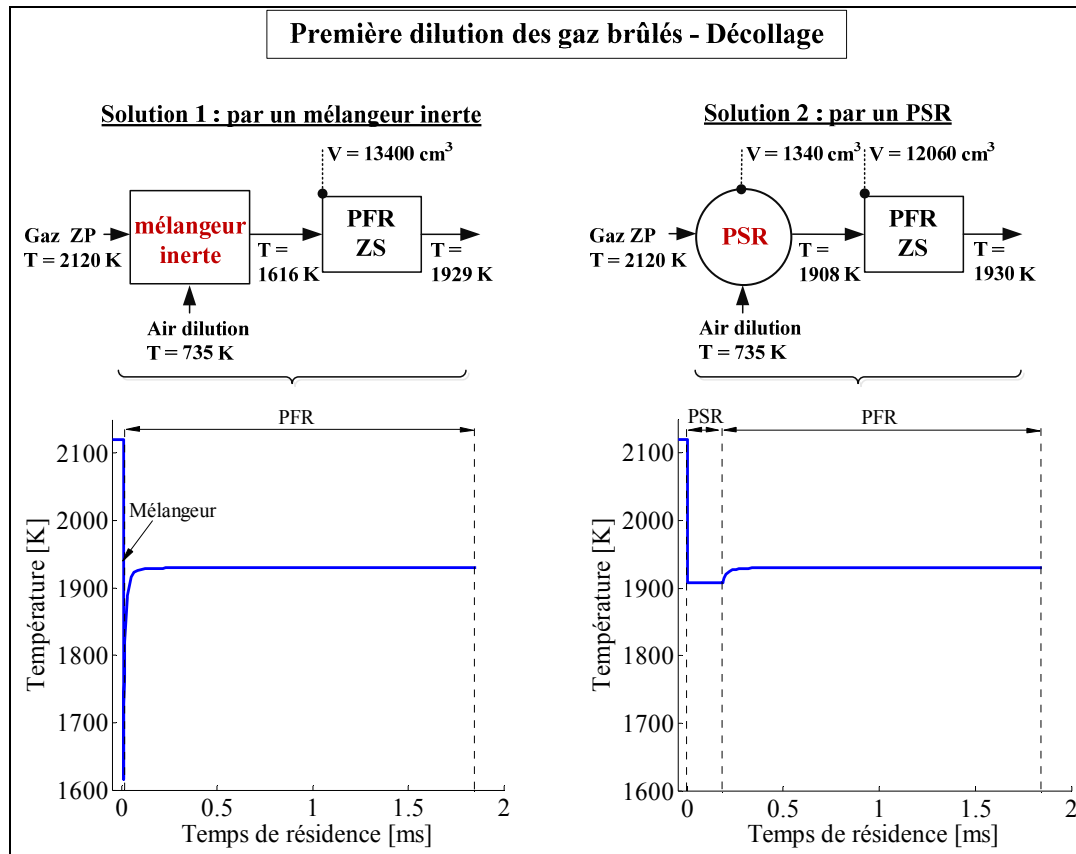


Figure 5.9 Analyse du profil de température dans le PFR de la zone secondaire (ZS) pour deux modèles de dilution des gaz brûlés issus de la zone primaire (ZP)

Ces derniers résultats suggèrent d'analyser dans le futur d'autres sources possibles pour ces écarts de concentration finale en C_2H_2 et en aromatiques. On a pu remarquer par exemple que les valeurs calculées pour EIC_2H_2 dans le Tableau 5.3 étaient assez proches de celles mesurées expérimentalement à faible puissance moteur, mais qu'elles ne l'étaient pas à forte puissance. On peut voir dans ces résultats un parallèle aux valeurs obtenues sur les indices d'émissions du CO (Tableau 4.6) et renvoi à la problématique de non-représentation par le CRN actuel des différences de composition et de température entre l'écoulement en proche paroi et celui au cœur de la chambre de combustion. À cela s'ajoute l'emploi d'un modèle de kérosène ayant une composition initiale extrêmement simplifiée (trois espèces au lieu de plusieurs centaines). Ce modèle simplifié permet de retranscrire les principales propriétés thermochimiques du kérosène, mais a vraisemblablement des répercussions sur les concentrations finales en hydrocarbures calculées en sortie de moteur.

Au sujet des répercussions de ces chutes de concentrations en C_2H_2 et en aromatiques sur les particules de suie, celles-ci doivent être quelque peu relativisées. En effet, on constate en analysant la Figure 5.8 que les concentrations en aromatiques en sortie zone primaire sont à la base relativement faibles (< 10 ppm) et que par conséquent, leur impact sur la croissance des particules de suie en aval est moins problématique. Il en va de même pour le C_2H_2 , qui bien qu'ayant une concentration plus élevée en sortie de zone primaire, a en réalité plus de chance d'être oxydé en CO_2 par l'apport d'air de dilution que de participer aux réactions de formation des PAHs ou de croissance des suies.

5.6 Conclusion partielle

Dans ce chapitre, la prédictibilité du modèle de CRN sur les émissions de particules de suie a été évaluée à l'aide du modèle de formation des particules couplé à la cinétique de combustion du kérosène et de formation des PAHs. Cette évaluation s'est concentrée sur l'analyse des indices d'émissions massiques (Elm), de nombre de particules (Eln) et de leur diamètre moyen (Dp) calculés par le modèle conjointement aux données expérimentales de l'étude APEX-1, pour différentes configurations moteur.

Les premiers résultats obtenus montrent une évolution de ces trois paramètres avec la puissance moteur qui est cohérente avec les tendances expérimentales, excepté pour le cas du ralenti. Le modèle parvient à estimer des valeurs d' Eln pour les configurations approche à décollage qui sont comprises dans l'intervalle de celles mesurées. Toutefois, on constate aussi une surévaluation des diamètres moyens Dp calculés qui conduit à des valeurs d' Elm trop élevées. Cette dernière observation a amené à opérer un ajustement des coefficients de réaction du sous-mécanisme de croissance pour particules HACA employé.

La modification apportée à ce sous-mécanisme a permis d'obtenir des améliorations significatives à la fois sur les diamètres Dp , désormais compris dans l'intervalle des valeurs rencontrées expérimentalement et sur les valeurs d' Elm , qui restent néanmoins toujours

supérieures aux valeurs mesurées. Par contre, cette modification a eu pour effet de favoriser la production d'un plus grand nombre de particules et entraîne une surestimation d' EIn dans chacune des configurations (hormis le cas de l'approche où les trois paramètres calculés sont globalement bons). Ce résultat souligne le couplage existant entre EIn et Dp et met en évidence la difficulté d'avoir simultanément le bon nombre de particules au bon diamètre moyen en jouant uniquement sur leur mécanisme de croissance individuel. Par ailleurs, la faible décroissance des valeurs d' EIn relevée le long du CRN suggère d'implanter ultérieurement un sous-mécanisme d'agrégation et/ou de revoir le modèle de nucléation. Cette même analyse sur l'évolution d' EIn le long du CRN a aussi démontré que les modules postchambre du CRN ont une faible influence sur ce paramètre, de même que sur Dp . Il apparaît alors que les problématiques de températures soulevées au chapitre 4 pour ces modules ne peuvent pas à elles seules expliquer les écarts observés sur ces paramètres.

Parallèlement aux analyses d' EIn et de Dp le long du CRN, l'examen des profils de concentration de quelques espèces précurseurs de suies a pour sa part mis en évidence une sous-estimation par le CRN de ces espèces en sortie de moteur, notamment à forte puissance. Ces écarts sont dus à une oxydation quasi totale de ces espèces au travers de la zone secondaire, qui remet ainsi en question la modélisation de cette zone et de la transition des gaz brûlés depuis la zone primaire. Toutefois, l'impact sur les suies de cette chute de concentration en précurseurs reste minime, puisque ces espèces ont en réalité plus de chance d'être oxydées par les apports d'air de dilution que de contribuer au mécanisme de croissance des suies à partir de la zone secondaire.

Finalement, l'analyse des valeurs d' EIm en fonction du paramètre de mélange S a soulevé également la possibilité d'une erreur sur les valeurs calibrées de ce paramètre. Une analyse de sensibilité sur ces valeurs calibrées a permis de montrer qu'une incertitude réaliste sur la température en entrée de chambre de combustion et/ou sur le pourcentage d'air alloué à la zone primaire peut conduire à avoir des valeurs de S pour lesquelles les seuils d' EIm sont cette fois dans la gamme de ceux observés expérimentalement (notamment aux fortes puissances moteur).

CONCLUSION

L'objectif de ce mémoire était de développer un modèle numérique 0D/1D de combustion dans les turbines à gaz aéronautiques et d'évaluer sa capacité à reproduire les émissions de particules de suie à travers différentes configurations de vol.

Ce document a examiné l'application du concept de réseau de réacteurs chimiques (CRN) pour modéliser la formation et l'évolution des émissions polluantes au sein d'une turbine à gaz aéronautique. Cette démarche permet d'obtenir une représentation simplifiée du processus de combustion et de postcombustion dans les zones caractéristiques du moteur et d'employer ainsi une cinétique chimique détaillée de combustion du kérosène, de formation des précurseurs de suies, de même qu'un modèle dynamique de formation des particules de suie au sein des réacteurs du CRN. Le modèle de CRN présenté dans ce mémoire ne requiert ni la connaissance préalable du temps de résidence des gaz dans chacune des zones du moteur, ni de leur température. Il nécessite néanmoins une estimation de la répartition des débits d'air dans la chambre de combustion, des volumes associés aux zones modélisées et une connaissance des paramètres thermodynamiques en entrée de la chambre de combustion. Les calculs thermodynamiques et chimiques dans les réacteurs du CRN ont été réalisés à l'aide de la routine AURORA® du logiciel de calcul de cinétique chimique CHEMKIN/CHEMKIN-PRO®.

Le modèle de CRN proposé a été appliqué aux configurations de vol du cycle LTO (« Landing-Take-Off ») pour le moteur CFM56-2C1 employé dans l'étude sur les émissions de particules aéronautiques APEX-1 (Wey et al., 2006). Cette étude expérimentale regroupe un ensemble de mesures en sortie de moteur sur des concentrations de polluants dont notamment les particules de suie. Une première phase de validation du CRN a consisté à analyser la capacité du modèle à reproduire les conditions thermodynamiques au sein du moteur et les concentrations de polluants caractéristiques en sortie (CO_x , NO_x , SO_x , H_2O) sur plusieurs configurations de vol. Cette analyse a montré une représentativité des conditions thermodynamiques et chimiques qui est globalement satisfaisante pour un tel

modèle, particulièrement à forte puissance. En effet, les profils et les valeurs de température et de temps de résidence des gaz brûlés obtenus sont dans l'ensemble en bon accord avec ceux rencontrés dans des turbines à gaz aéronautiques modernes. Bien que le modèle de CRN ne réussisse pas à déterminer avec exactitude les indices d'émissions du CO ($EICO$) et d'espèces plus minoritaires telles que des hydrocarbures imbrûlés à forte puissance, de même que les NO_x ($EINO_x$) à faible puissance, il parvient cependant à estimer des valeurs d' $EICO$ à faible puissance et d' $EINO_x$ à forte puissance (configurations où chacune de ces émissions est maximale) qui sont dans l'intervalle d'incertitude des valeurs expérimentales.

Le modèle a été employé dans un second temps pour la prédiction des indices d'émissions en masse (EIm) et en nombre (EIn) d'une population de particules de suie et de son diamètre moyen (D_p) en sortie de moteur. Au préalable, un mécanisme de formation et de croissance des particules de suie a dû être défini et validé sur une étude de référence (Marr et al., 1994). Ce mécanisme a pu être couplé par la suite avec une cinétique de combustion du kérosène grâce au développement récent d'un mécanisme complémentaire de formation des précurseurs de suies (PAHs) (Saffaripour et al., 2014). Les trois propriétés EIm , EIn et D_p ont été déterminées à l'aide de la méthode des moments, directement implantée dans le module PARTICLE TRACKING FEATURE® du logiciel CHEMKIN-PRO. Par cette méthode et avec un ordinateur standard, le temps de calcul pour la détermination des émissions de particules de suie sur une configuration de vol est de moins de 15 minutes.

Même si le modèle parvient à obtenir des valeurs d' EIn qui sont dans les intervalles des valeurs expérimentales, la surestimation des diamètres D_p dans chaque configuration moteur s'avère problématique et conduit à des valeurs d' EIm trop élevées. Sur la base d'une analyse de sensibilité portant sur les réactions du mécanisme pour particules, un ajustement a été opéré sur les coefficients de réaction du sous-mécanisme de croissance par addition d'acétylène (HACA) utilisé. Cet ajustement a permis d'obtenir des valeurs de D_p convenables et par conséquent une amélioration notable d' EIm pour la gamme de puissance allant de l'approche (30 % P_{max}) à celle du décollage (100 % P_{max}). Toutefois, les valeurs d' EIm dans les configurations de forte puissance restent supérieures aux données

expérimentales en raison d'un accroissement du nombre de particules après l'ajustement opéré. Ainsi, ces derniers résultats ne permettent qu'une validation partielle des capacités du modèle à prédire simultanément les trois paramètres Elm , EIn et Dp . Bien que les incertitudes et les hypothèses établies sur certains paramètres d'entrée du CRN pourraient expliquer les écarts restant sur les valeurs d' Elm à forte puissance, il s'avère néanmoins que l'évolution du nombre de particules au sein du CRN est relativement faible depuis la sortie de la zone primaire jusqu'à celle du moteur. Ce dernier constat souligne la nécessité de revoir entre autres le modèle de nucléation et d'envisager à l'avenir l'implantation d'un mécanisme d'agrégation des particules.

Malgré la nécessité d'apporter des améliorations au CRN pour turbines à gaz aéronautiques proposé et aux cinétiques employées afin de s'assurer de la qualité des prédictions sur les émissions de suies, ce modèle 0D/1D représente de par sa simplicité et son faible coût de calcul une perspective prometteuse pour l'application d'études paramétriques sur l'influence du type de carburant, des conditions de vol ou encore des paramètres moteurs sur les émissions de particules aéronautiques.

RECOMMANDATIONS

Pour donner suite à cette étude, plusieurs recommandations sont proposées pour approfondir et améliorer la qualité des prédictions sur les émissions de particules de suie. Celles-ci portent d'une part sur le modèle de CRN proposé et d'autre part sur le mécanisme de formation des particules de suie utilisé.

Modèle de CRN

- Obtenir des données constructeur plus précises sur les conditions thermodynamiques en entrée de chambre de combustion et sur la distribution de l'air dans chacune de ses zones. Ces paramètres influent sensiblement sur la production d'émissions polluantes et sur l'évaluation du paramètre de mélange S dans les configurations moteur étudiées.
- Implanter un modèle pour la zone primaire qui tient compte de l'aspect de diffusion des flammes rencontrées dans les turbines à gaz avec injection de carburant liquide. Le fait de considérer la combustion de gouttelettes de carburant liquide peut jouer sensiblement sur la distribution du mélange air-carburant et les températures atteintes dans cette zone. Une telle modélisation a déjà été proposée par Rezvani (2010) dans son étude. Elle requiert néanmoins la connaissance des propriétés physiques du carburant (délai d'inflammation, vitesse d'évaporation) et surtout celles de l'injecteur employé (taille des gouttelettes produites).
- Effectuer une étude expérimentale sans combustion sur la distribution du carburant dans la zone primaire, pour plusieurs conditions d'opération. Cette étude fournira directement des valeurs du paramètre de mélange S sur différentes configurations moteur et permettra d'entreprendre par la suite une deuxième phase de validation du CRN.
- Envisager un modèle de zone primaire avec un mélange progressif des gaz brûlés issus des PSRs de cette zone. Au lieu du modèle actuel où tous les produits de combustion issus des 135 PSRs sont dilués avec l'air dans un seul mélangeur, une solution envisageable serait de mélanger progressivement les gaz brûlés issus de ces 135 PSRs dans par exemple 50 PSRs intermédiaires, puis 10 et de les diluer avec l'air avant d'être introduit dans la zone secondaire. Cette structure arborescente de PSRs permettrait peut-

être une meilleure représentation de la transition thermique et chimique subies par les produits de combustion entre la zone primaire et secondaire.

- Analyser les conséquences de l'implantation d'un modèle à deux PFRs en parallèle pour la zone secondaire (écoulement en proche paroi et au cœur de la chambre de combustion) sur les émissions de CO et d'hydrocarbures imbrûlés. Ce modèle nécessite néanmoins de supposer une répartition du débit de gaz brûlés à allouer à chaque PFR.
- Affiner la modélisation des modules turbines au moyen de données constructeur, en considérant l'interaction entre les gaz brûlés et les étages internes de ces modules. Ceci permettra d'évaluer plus précisément l'impact de ces étages sur la thermodynamique de l'écoulement et par conséquent sur les concentrations des espèces chimiques.

Mécanisme de formation et d'évolution des particules de suie

La perspective d'amélioration la plus significative serait obtenue par une meilleure sensibilité des cinétiques employées (combustion du kérosène, formation des PAHs et des particules) aux conditions thermodynamiques, à la composition du carburant et aux types de flammes rencontrés dans les turbines à gaz aéronautiques. Toutefois, une telle amélioration requiert la mise en œuvre d'études numériques et expérimentales relativement complexes. Plusieurs modifications plus réalistes peuvent être néanmoins envisageables à court terme.

- Intégrer un modèle de nucléation composé de plusieurs réactions de dimérisation en parallèle de celle du pyrène ($C_{16}H_{10}$), avec notamment des molécules de masse molaire plus élevées telles que le coronène ($C_{24}H_{12}$). Ceci pourrait jouer sur la qualité des prédictions du CRN en matière de nombre de particules produites.
- Évaluer d'autres mécanismes HACA et de condensation de PAHs qui soient plus détaillés. En effet, certains modèles de croissance des suies (par exemple Celnik et al., 2008) tiennent compte de l'existence de plusieurs types de sites en surface de la particule, ce qui permet la fixation de molécules spécifiques. L'existence de ces différents sites peut avoir une influence sur la cinétique de croissance des particules.
- Implanter un modèle d'agrégation des particules (le modèle de coalescence pure employé dans ce mémoire étant discutable) afin de tenir compte des interactions postflamme entre les particules et de l'évolution de leur nombre.

ANNEXE I

RÉPARTITION DE LA FRACTION DE MÉLANGE DANS LES PSRs DE LA ZONE PRIMAIRE

La méthodologie de calcul dans cette annexe a été développée à partir des travaux de Rezvani (2010).

- Paramétrage initial

Le réseau de réacteurs utilisé pour modéliser la zone primaire est composé de N PSRs en parallèle. La richesse moyenne dans la zone primaire est notée φ_{ZP} et le paramètre de mélange dans cette zone est fixé à S . Rappelons que l'écart type σ de la distribution normale de la fraction de mélange se définit alors par $\sigma = S \cdot \varphi_{PZ}$ (relation (2.10)).

On définit le débit total de mélange air-carburant arrivant dans la zone primaire par

$$\dot{m}_{tot_PZ} = \dot{m}_{air_PZ} + \dot{m}_{fuel} \quad (A-1.1)$$

La loi de distribution du mélange étant définie par une loi normale, la plage de richesse étudiée est comprise entre $[\varphi_{ZP} - 3\sigma ; \varphi_{ZP} + 3\sigma]$ de façon à avoir près de 99.7 % des valeurs possibles prises par la richesse (c.-à-d. 99.7 % de l'aire totale sous la courbe de distribution).

- Calcul de la fraction de mélange air+carburant allouée à chaque PSRs

La plage de richesse $[\varphi_{ZP} - 3\sigma ; \varphi_{ZP} + 3\sigma]$ est discrétisée en N intervalles avec un pas de discrétisation défini par

$$\Delta\varphi = \frac{6\sigma}{N}. \quad (A-1.2)$$

Chaque PSR « k » se voit dès lors alloué la richesse φ_k (richesse médiane du $k^{\text{ème}}$ intervalle) donnée par

$$\varphi_k = (\varphi_{PZ} - 3\sigma) + \frac{\Delta\varphi}{2} + (k-1)\Delta\varphi, \quad k=1,2,\dots,N. \quad (A-1.3)$$

La fraction de mélange attribuée au $k^{\text{ème}}$ PSR est donnée par la relation

$$\frac{\dot{m}_{tot,k}}{\dot{m}_{tot_PZ}} = \left[F\left(\varphi_k + \frac{\Delta\varphi}{2}\right) - F\left(\varphi_k - \frac{\Delta\varphi}{2}\right) \right] (1 + C_truncat), \quad (A-1.4)$$

avec

$\dot{m}_{tot,k}$: le débit massique de mélange air-carburant distribué au $k^{\text{ème}}$ PSR, en [kg/s],

$F(\varphi_k)$: la fonction de répartition associée à la distribution normale (φ_{ZP} ; σ),

définie par

$$F(\varphi_k) = \text{Probabilité}(\varphi < \varphi_k) = \int_{-\infty}^{\varphi_k} f(\varphi) d\varphi, \quad (A-1.5)$$

où f est la densité de probabilité associée à la loi normale et qui est définie par la relation (2.10). Dans la relation (A-1.4), $C_truncat$ fait référence à l'aire sous la courbe associée aux extrémités $]-\infty ; \varphi_{ZP} - 3\sigma]$ et $[\varphi_{ZP} - 3\sigma ; +\infty [$ tronquées (correction à apporter pour renormaliser la distribution).

Il se peut pour certaines valeurs du couple (φ_{ZP} ; S) que les valeurs φ_k soient négatives (lorsque $\varphi_{ZP} - 3\sigma < 0$). Dans ce cas particulier, la troncature inférieure de la distribution ne se fait pas en $\varphi_{ZP} - 3\sigma$ mais en 0 et la plage de richesse étudiée devient alors $[0 ; 6\sigma]$ (Le nombre d'intervalles N et le pas de discrétisation $\Delta\varphi$ sont conservés). L'aire sous la portion de la courbe tronquée est par la suite redistribuée de manière similaire au cas sans troncature de richesses négatives (seule la fonction $C_truncat$ varie dans l'équation (II.4) dû aux changements des bornes de troncature).

En considérant que le carburant possède un ratio carburant/air en masse à la stœchiométrie f_{st} , on obtient alors la quantité de carburant et d'air distribuée à chaque PSR à l'aide des relations ci-dessous.

$$\dot{m}_{air,k} = \frac{1}{f_{st} \cdot \varphi_k + 1} \dot{m}_{tot,k} \quad (A-1.6)$$

$$\dot{m}_{fuel,k} = \dot{m}_{tot,k} - \dot{m}_{air,k} \quad (A-1.7)$$

ANNEXE II

PARAMÈTRES INITIAUX À DÉFINIR DANS LE MODÈLE DE CRN POUR TURBINES À GAZ AÉRONAUTIQUES

Les Tableaux-A II-3 et 4 définissent les paramètres initiaux à renseigner pour la réalisation des calculs dans les PSRs et PFRs du CRN de la chambre de combustion et des modules postchambre. Les Tableaux-A II-1 et 2 donnent la nomenclature associée à ces paramètres.

Tableau-A II-1 Nomenclature des paramètres initiaux pour le
CRN de la chambre de combustion

Nomenclature		Unité
$\dot{m}_{air_Dil^\circ_paroi_k}$	Débit massique d'air, de dilution de refroidissement pariétal du k ^{ème} PSR (uniquement pour ZP)	kg/s
\dot{m}_{fuel}	Débit massique de carburant	kg/s
T_{air_fuel}	Température de l'air, du carburant	K
V_k	Volume du k ^{ème} PSR	cm ³
P	Pression dans le PSR/PFR/Mélangeur	atm
T_{cvge}	Estimation température finale (aide à la convergence des calculs)	K
S_{moy}	Section moyenne de la zone (pour PFR)	cm ²
L	Longueur axiale de la zone (pour PFR)	cm

Tableau-A II-2 Nomenclature des paramètres initiaux pour le CRN postchambre

Nomenclature		Unité
P_0	Pression totale en entrée ou sortie de module Remarque : « _55 » correspond à la localisation dans la tuyère où la section est minimale (col)	atm
T_0	Température totale en entrée ou sortie de module	K
S	Section en entrée ou sortie de module	cm ²
L	Longueur axiale du module	cm
Π	Ratio de pression totale entre la sortie et l'entrée des modules turbine	-

Tableau-A II-3 Paramètres initiaux pour le CRN de la chambre de combustion

Paramètres à définir					
PSRs_ZP	MEL_ZS	PFR_ZS	MEL_ZD	PFR_ZD	MEL_OUT
\dot{m}_{air_k}	$\dot{m}_{air_1ere_Dil^\circ}$	S_{moy_ZS}	$\dot{m}_{air_2eme_Dil^\circ}$	S_{moy_ZS}	$\dot{m}_{air_paroi_ZS}$
\dot{m}_{fuel_k}	$\dot{m}_{air_paroi_ZP}$	L_{ZS}	$\dot{m}_{air_paroi_ZS}$	L_{ZS}	T_{air}
V_k	T_{air}	P	T_{air}	P	P
T_{air}	P		P		T_{cvge}
T_{fuel}	T_{cvge}		T_{cvge}		
P					
T_{cvge}					

Tableau-A II-4 Paramètres initiaux pour le CRN postchambre

Paramètres à définir		
PFR_THP	PFR_TBP	PFR_TUY
$P_{0,4}$	$P_{0,45}$	$P_{0,5}$
$P_{0,45}$	$P_{0,5}$	$P_{0,9}$
S_4	S_{45}	S_5
S_{45}	S_5	S_{55}
L_{THP}	L_{TBP}	S_9
Π_{THP}	Π_{TBP}	L_{TUY_1}
		L_{TUY_2}

ANNEXE III

EXPRESSIONS DE LA FRÉQUENCE DE COLLISION ENTRE PARTICULES EN FONCTION DU NOMBRE DE KNUDSEN (Kn)

Adaptées de Kazakov et Frenklach (1998, p. 485 et 486)

- Régime moléculaire ($Kn \gg 1$)

$$\beta_{i,j}^m = K_m \sqrt{\frac{1}{m_i} + \frac{1}{m_j}} (m_i^{1/3} + m_j^{1/3})^2, \quad (\text{A-3.1})$$

$$K_m = \xi \sqrt{\frac{6k_B T}{\rho_s}} \left(\frac{3m_c}{4\pi\rho_s} \right)^{1/6},$$

avec

$\beta_{i,j}^m$: la fréquence de collision en régime moléculaire entre les particules de classe

i et j , en $[\text{s}^{-1}]$,

m_i, m_j : la masse d'une particule de classe i (respectivement de classe j), en $[\text{kg}]$,

ξ : « facteur d'accroissement de Van Der Walls »

($\xi \approx 2.2$ dans le cas des particules de suie),

k_B : constante de Boltzmann ($k_B = 1.381\text{E-}23$ J/K),

T : Température du gaz environnant la particule, en $[\text{K}]$,

ρ_s : masse volumique d'une particule de suie, supposé égale à 1800 kg/m^3 ,

m_c : masse d'un atome de carbone ($m_c \approx 1.994\text{E-}26$ kg).

- Régime continu ($Kn \ll 1$)

$$\beta_{i,j}^c = K_c \left(\frac{C_i}{m_i^{1/3}} + \frac{C_j}{m_j^{1/3}} \right) (m_i^{1/3} + m_j^{1/3}), \quad (\text{A-3.2})$$

$$K_c = \frac{2k_B T}{3\eta},$$

avec

$\beta_{i,j}^c$: la fréquence de collision en régime continu entre les particules de classe i et j , en $[s^{-1}]$,
 C_i, C_j : « facteur de correction de glissement de Cunningham »,
 où $C_i = C_j = C = 1 + 1.257Kn$, avec Kn le nombre de Knudsen,
 η : viscosité dynamique du gaz environnant, en $[kg/(m.s)]$.

- Régime de transition ($Kn \sim 1$)

Les régimes moléculaire et continu sont assez bien compris en pratique et les expressions qui leur sont associées sont assez simples. Le cas du régime de transition est quant à lui plus complexe à étudier (analogie avec le régime de transition en mécanique des fluides et les régimes laminaire et turbulent). L'expression pour $\beta_{i,j}^t$ en régime de transition peut être évaluée par la moyenne harmonique entre les valeurs asymptotiques de la fréquence de collision en régime moléculaire et continu (Pratsinis, 1988), ce qui donne :

$$\beta_{i,j}^t = \frac{\beta_{i,j}^m \beta_{i,j}^c}{\beta_{i,j}^m + \beta_{i,j}^c}, \quad (A-3.3)$$

ANNEXE IV

DÉTERMINATION DES PROPRIÉTÉS DE LA POPULATION DE PARTICULES PAR LA MÉTHODE DES MOMENTS

Supposons une fonction de distribution des particules $n(i)$, où i peut représenter la dimension ou la masse d'une particule (avec en théorie $0 < i < \infty$). Le $k^{\text{ème}}$ moment de la fonction de distribution $n(i)$ est défini par (adaptée de Reaction-Design, 2013a, pp. 271, 272 et 273) :

$$M_k = \int_0^\infty i^k n(i) di, \quad (\text{A-4.1})$$
$$k = 0, 1, 2, \dots$$

En supposant que la dimension ou la masse de toutes les particules de la population est un multiple entier j d'une particule insécable de diamètre D_l et de masse m_l , définissant ainsi la notion de particule de classe j (avec $D_j = j \times D_l$ et $m_j = j \times m_l$), il est alors possible de représenter la distribution de ces classes par une fonction discrète N_j et l'équation (A-4.1) devient équivalente à

$$M_k = \sum_{j=1}^{\infty} j^k N_j, \quad (\text{A-4.2})$$
$$k = 0, 1, 2, \dots$$

Même si la connaissance de tous les moments M_k ($k = 0, 1, \dots, \infty$) est équivalente à connaître la fonction de distribution en elle-même, il n'est pas nécessaire de tous les calculer ni même de connaître la fonction de distribution (Frenklach, 2002a). Seule la connaissance de quelques-uns de ces moments permet de définir à un instant t les caractéristiques principales de la population de particules, à savoir (tirées de Reaction-Design, 2013a)

- le nombre total de particules N_Σ

$$N_\Sigma = \sum_{j=1}^{\infty} N_j = M_0, \quad (\text{A-4.3})$$

- la masse moyenne \bar{m}_p des particules

$$\bar{m}_p = \frac{m_\Sigma}{N_\Sigma} = \frac{\sum_{j=1}^{\infty} (j \times m_l) N_j}{N_\Sigma} = m_l \frac{M_l}{M_0}, \quad (\text{A-4.4})$$

avec

m_l : la masse de la plus petite particule de la population (particule de classe 1, souvent celle issue de la réaction de nucléation),

- le diamètre moyen \bar{D}_p des particules (en supposant que les particules sont sphériques)

$$\bar{D}_p = \frac{\sum_{j=1}^{\infty} (j^{1/3} \times D_l) N_j}{N_\Sigma} = D_l \frac{M_{1/3}}{M_0}, \quad (\text{A-4.5})$$

avec

D_l : diamètre de la particule de classe 1,

- la surface totale $A_{S,\Sigma}$ en sphère équivalente de la population totale de particules (paramètre d'intérêt, notamment dans les calculs associés aux réactions de surface)

$$A_{S,\Sigma} = \sum_{j=1}^{\infty} (j^{2/3} \times A_{S,l}) N_j = A_{S,l} M_{2/3}, \quad (\text{A-4.6})$$

avec

$A_{S,l}$: la surface de la particule de classe 1.

On remarque que seule la connaissance des premiers moments est nécessaire pour établir ces caractéristiques de la population. Le calcul de ces premiers moments (M_0 , $M_{1/3}$, $M_{2/3}$, M_l) s'appuie sur une reformulation des équations de coagulation de Smoluchowski (équations (3.4) et (3.5) au chapitre 3) sous forme de taux de variations des moments de la population de particules. Le détail mathématique associé à cette reformulation peut être obtenu dans les articles de Frenklach et Harris (1987) et Frenklach (2002a).

ANNEXE V

ÉVALUATION DES PARAMÈTRES THERMODYNAMIQUES DU MOTEUR CFM56-2C1 (ÉTUDE APEX-1)

Le rapport associé à l'étude APEX-1 de Wey et al. (2006) fournit les valeurs normalisées $T_{0,3_n}$ et $P_{0,3_n}$ respectivement de la température et de la pression en entrée de chambre de combustion pour chacune des configurations moteur étudiées. Celles-ci sont définies par :

$$P_{0,3_n} = \frac{P_{0,3}}{P_{0,3} \text{ à } 100\% \text{ poussée, dans une journée standard } (T_{amb} = 288.15 \text{ K ; } P_{amb} = 1 \text{ atm})}, \quad (\text{A-5.1})$$

$$T_{0,3_n} = \frac{T_{0,3}}{T_{0,3} \text{ à } 100\% \text{ poussée, dans une journée standard } (T_{amb} = 288.15 \text{ K ; } P_{amb} = 1 \text{ atm})} \quad (\text{A-5.2})$$

La valeur de $P_{0,3}$ à 100 % de poussée et dans les conditions standards atmosphériques correspond à la valeur du ratio de compression du moteur Π_∞ au point fixe, dans la configuration décollage et au niveau de la mer, qui dans le cas du moteur CFM56-2C1 est égale à 23.5 (Wey et al., 2006). Les valeurs de $P_{0,3}$ déduites sont répertoriées dans le Tableau-A V-1 ci-dessous.

Tableau-A V-1 Pressions totales en entrée de chambre de combustion pour
le moteur CFM56-2C1
adaptées de Wey et al. (2006, p. 60 et 61)

Configuration	Décollage	Montée	Approche	Ralenti
Numéro du test	n°902	n°903	n°859	n°860
Pression totale normalisée $P_{0,3_n}$	0.847	0.790	0.358	0.148
Pression totale $P_{0,3}$ (atm)	19.9	18.6	8.4	3.5

En ce qui concerne la valeur de $T_{0,3}$ à 100 % de poussée et dans les conditions standards, celle-ci s'obtient à partir de la relation thermodynamique

$$T_{0,3_{(100\% Pmax ; std)}} = T_{0,1_std} \left[1 + \frac{(\Pi_{\infty})^{\frac{\bar{\gamma}-1}{\bar{\gamma}}} - 1}{\eta_c} \right] \quad (\text{A-5.3})$$

avec

$T_{0,1_std}$: température atmosphérique dans les conditions standard au niveau de la mer ($T_{0,1_std} = 288.15 \text{ K}$),

Π_{∞} : ratio de compression du moteur au point fixe, configuration décollage et au niveau de la mer ($\Pi_{\infty} = 23.5$),

$\bar{\gamma}$: ratio moyen des chaleurs spécifiques de l'air au travers des modules compresseurs du moteur ($\bar{\gamma} \approx 1.37$, Seers, 2012),

η_c : rendement isentropique des modules compresseurs du moteur ($\eta_c \approx 0.85$, Roux, 2005 ; Seers, 2012)

Les valeurs de $T_{0,3}$ déduites sont répertoriées dans le Tableau-A V-2.

Tableau-A V-2 Températures totales en entrée de chambre de combustion pour le moteur CFM56-2C1
adaptées de Wey et al. (2006, p. 60 et 61)

Configuration	Décollage	Montée	Approche	Ralenti
Numéro du test	n°902	n°903	n°859	n°860
Température totale normalisée $T_{0,3_n}$	0.988	0.968	0.803	0.640
Température totale $T_{0,3}$ [K]	735	720	598	476

ANNEXE VI

DIMENSIONS CARACTÉRISTIQUES DE LA CHAMBRE DE COMBUSTION DU MOTEUR F101-PV ET DES MODULES POSTCHAMBRE

- Dimensions caractéristiques de la chambre de combustion annulaire du moteur F101-PV

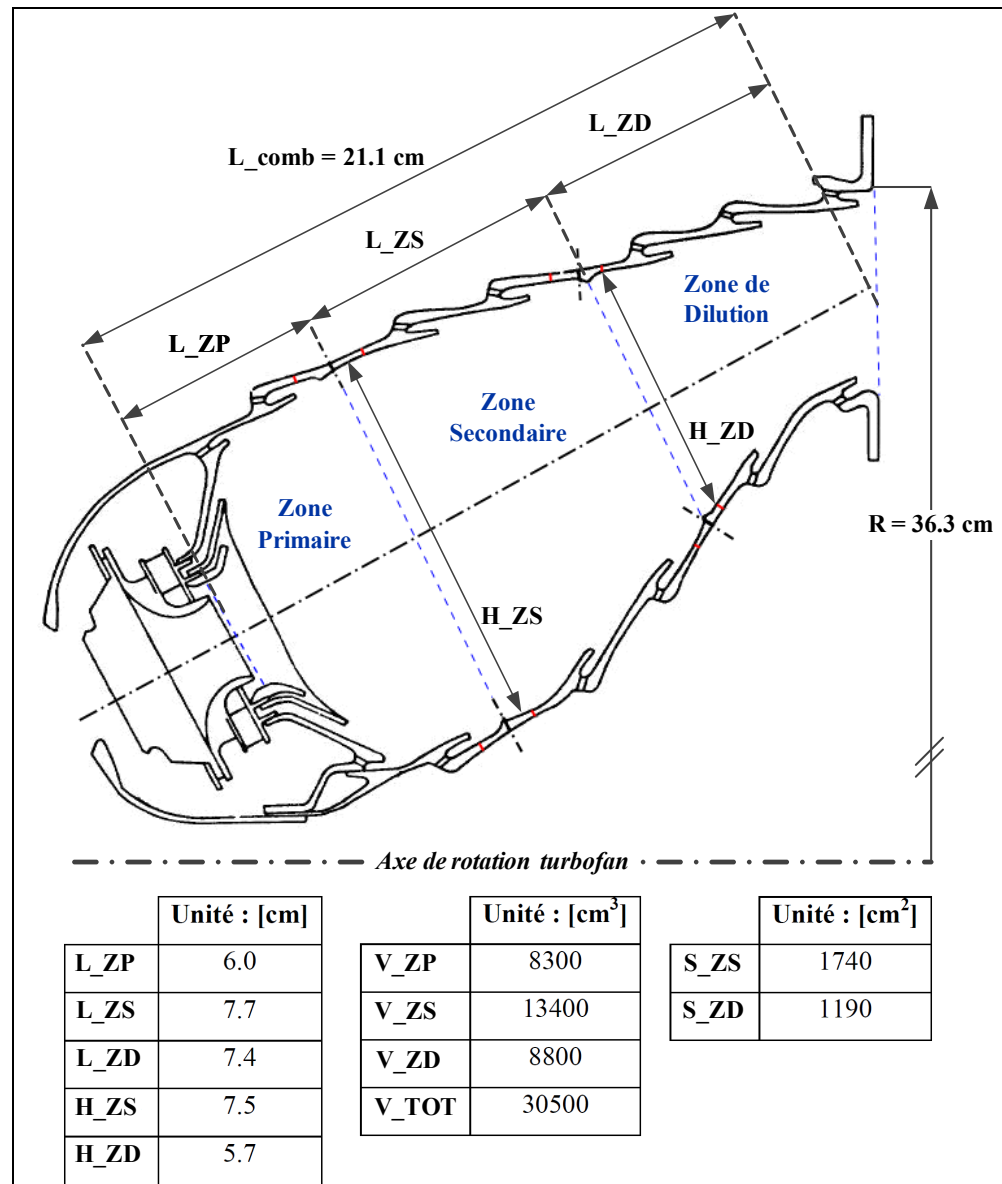


Figure-A VI-1 Vue en coupe de la chambre de combustion annulaire du moteur F101-PV et dimensions caractéristiques
Adapté de Burrus, Sabla et Bahr (1980, p. 11)

- Dimensions caractéristiques des modules turbines et tuyère pour un moteur CFM56-3

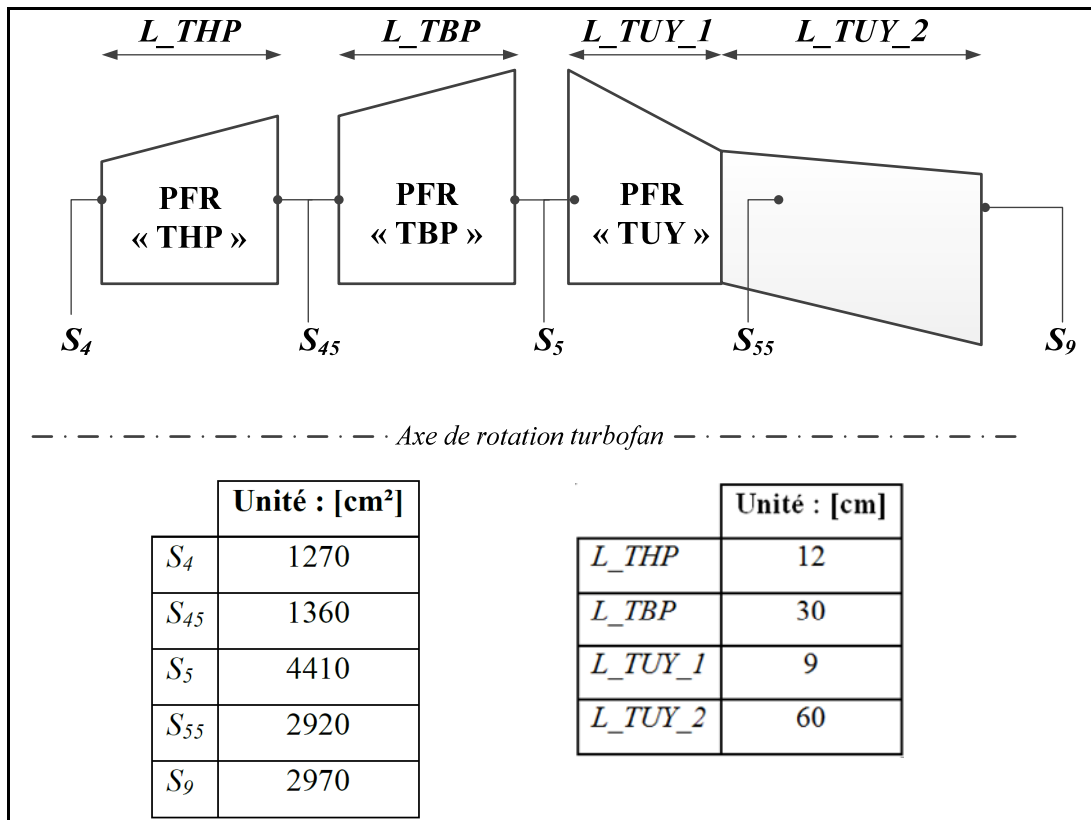
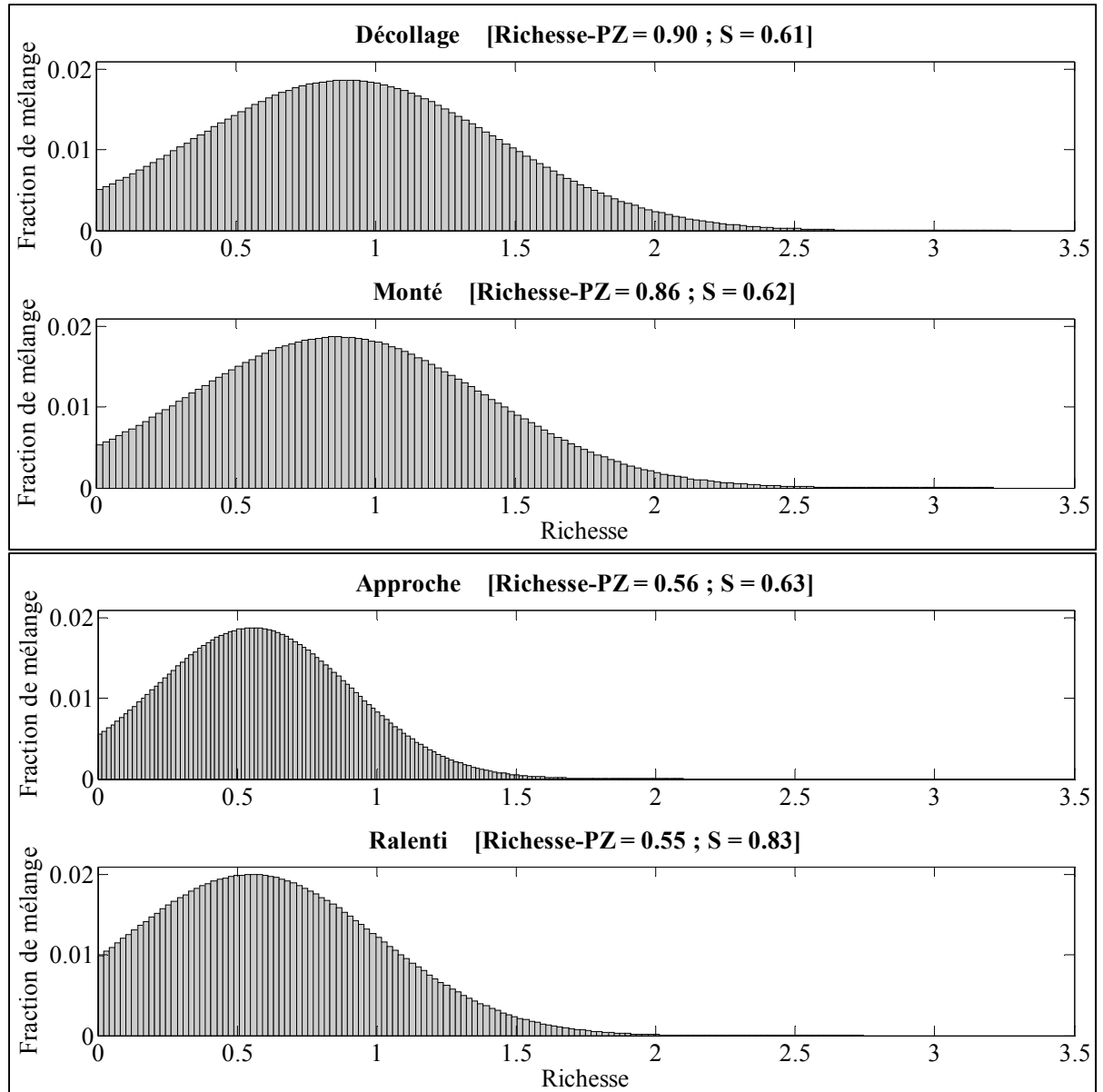


Figure-A VI-2 Dimensions caractéristiques des modules turbines et tuyère pour un moteur CFM56-3 (d'après données de l'ONERA)

ANNEXE VII

DISTRIBUTION DE LA FRACTION DE MÉLANGE POUR LES VALEURS DU PARAMÈTRE DE MÉLANGE « S » RETENUES



Carburant : kérosène JET A-1 ; $f_{st} = 0.0677$; nombre de PSRs-ZP = 135

Figure-A VII-1 Distribution de la fraction de mélange pour les quatre configurations
de vol étudiées et leur paramétrage associé

BIBLIOGRAPHIE

- Agafonov, G. L., A. A. Borisov, V. N. Smirnov, K. Ya Troshin, P. A. Vlasov et Jürgen Warnatz. 2008. « Soot Formation During Pyrolysis of Methane and Rich Methane/Oxygen Mixtures Behind Reflected Shock Waves ». *Combustion Science and Technology*, vol. 180, n° 10-11, p. 1876-1899.
- Allaire, Douglas L. 2006. « A Physics-Based Emissions Model for Aircraft Gas Turbine Combustors ». Mémoire de maîtrise. Cambridge, MA, Massachusetts Institute of Technology, 105 p.
- Appel, Jörg, Henning Bockhorn et Michael Frenklach. 2000a. « Kinetic modeling of soot formation with detailed chemistry and physics: laminar premixed flames of C2 hydrocarbons ». *Combustion and Flame*, vol. 121, n° 1-2, p. 122-136.
- Appel, Jörg, Henning Bockhorn et Michael Frenklach. 2000b. *Kinetic modeling of soot formation with detailed chemistry and physics: laminar premixed flames of C2 hydrocarbons*. (Version abf_mech1bar). En ligne. Berkley, CA: University of Berkley. < <http://www.me.berkeley.edu/soot/mechanisms/abf.html> >. Consulté le 15 janvier 2014.
- Bahr, DW. 1987. « Technology for the design of high temperature rise combustors ». *Journal of Propulsion and Power*, vol. 3, n° 2, p. 179-186.
- Burrus, D. , P. E. Sabla et D. W. Bahr. 1980. *Energy efficient engine component development and integration : Single-annular combustor technology report*. NASA-CR-159685-R79AEG562. . Cleaveland, OH: NASA-Lewis Research Center, 118 p.
- Burrus, DL, CA Chahrour, HL Foltz, PE Sabla, SP Seto et JR Taylor. 1984. *Energy Efficient Engine : combustor test hardware _detailed design report*. 19900019238. Cleaveland (Oh.): NASA-Lewis Research Center, 497 p.
< http://archive.org/details/nasa_techdoc_19900019239 >.
- Celnik, Matthew, Abhijeet Raj, Richard West, Robert Patterson et Markus Kraft. 2008. « Aromatic site description of soot particles ». *Combustion and Flame*, vol. 155, n° 1-2, p. 161-180.
- Chang, Clarence T. 2012. « Low-Emissions Combustors Development and Testing ». En ligne. 28 p.
<http://www.grc.nasa.gov/WWW/cdtb/aboutus/workshop2012/Presentations/Session%204.%20ActiveCombustionControl/ACC_2_Chang.pdf >. Consulté le 29 janvier 2014.

- Chou, C. -P., et P. Ho. 2006. *Soot nucleation and growth reaction mechanism*. (Version Mar. 2006). San Diego, CA: Reaction Design.
- Chung, Seung-Hyun. 2011. « Computational modeling of soot nucleation ». Thèse de doctorat. Ann Arbor, MI, University of Michigan, 182 p.
- CORAC, (CONseil pour la Recherche Aéronautique Civile). 2012. « CORAC - Réseau thématique Aéronautique et Environnement ». En ligne, 12 p.
<http://aerorecherche.corac.com/uploads/fileupload/7-05-2012/CORAC_RTE_Seminaire_2012.pdf>. Consulté le 16 octobre 2013.
- Dagaut, Philippe, et Sandro Gaïl. 2007. « Chemical Kinetic Study of the Effect of a Biofuel Additive on Jet-A1 Combustion† ». *The Journal of Physical Chemistry A*, vol. 111, n° 19, p. 3992-4000.
- Dagaut, Philippe, Florent Karsenty, Guillaume Dayma, Pascal Diévert, Kamal Hadj-Ali, Amir Mzê-Ahmed, Marina Braun-Unkhouff, Jürgen Herzler, Tupti Kathrotia, Thomas Kick, Clemens Naumann, Uwe Riedel et Levi Thomas. 2014. « Experimental and detailed kinetic model for the oxidation of a Gas to Liquid (GtL) jet fuel ». *Combustion and Flame*, vol. 161, n° 3, p. 835-847.
- De Blas, Luis Javier Molero. 1998. « Pollutant formation and interaction in the combustion of heavy liquid fuels ». Thèse de doctorat. Londres, University College London, 266 p.
- Echavarria, Carlos A., Isabel C. Jaramillo, Adel F. Sarofim et JoAnn S. Lighty. 2012. « Burnout of soot particles in a two-stage burner with a JP-8 surrogate fuel ». *Combustion and Flame*, vol. 159, n° 7, p. 2441-2448.
- Facchini, Andreini &. 2004. « Gas Turbines Design and Off-Design Performance Analysis with Emissions Evaluation ». *Journal of Engineering for Gas Turbines & Power*, vol. 126, n° 1, p. 83-91.
- Fichet, Vincent. 2008. « Modélisation de la combustion du gaz naturel par réseaux de réacteurs avec cinétique chimique détaillée ». Thèse de doctorat. Châtenay-Malabry, Ecole Centrale Paris, 267 p.
- Flagan, Richard C., et J.H. Seinfeld. 1988. *Fundamentals of air pollution engineering*. Englewood Cliffs, NJ: Prentice Hall, 554 p.
- Fletcher, Ronald S, et John B Heywood. 1971. « A model for nitric oxide emissions from aircraft gas turbine engines ». *AIAA paper*, vol. 71, p. 123.
- Frenklach, Michael. 2002a. « Method of moments with interpolative closure ». *Chemical Engineering Science*, vol. 57, n° 12, p. 2229-2239.

- Frenklach, Michael. 2002b. « Reaction mechanism of soot formation in flames ». *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 4, n° 11, p. 2028-2037.
- Frenklach, Michael, David W. Clary, William C. Gardiner Jr et Stephen E. Stein. 1985. « Detailed kinetic modeling of soot formation in shock-tube pyrolysis of acetylene ». *Symposium (International) on Combustion*, vol. 20, n° 1, p. 887-901.
- Frenklach, Michael, et Stephen J. Harris. 1987. « Aerosol dynamics modeling using the method of moments ». *Journal of Colloid and Interface Science*, vol. 118, n° 1, p. 252-261.
- Frenklach, Michael, et Hai Wang. 1991. « Detailed modeling of soot particle nucleation and growth ». *Symposium (International) on Combustion*, vol. 23, n° 1, p. 1559-1566.
- Gelbard, Fred, et John H. Seinfeld. 1980. « Simulation of multicomponent aerosol dynamics ». *Journal of Colloid and Interface Science*, vol. 78, n° 2, p. 485-501.
- Glassman, Irvin, et Richard A. Yetter. 2008. *Combustion*, 4th ed.. Boston, MA: Academic Press, xx, 773 p.
- Hewson, J. C., et M. Bollig. 1996. « Reduced mechanisms for NO_x emissions from hydrocarbon diffusion flames ». *Symposium (International) on Combustion*, vol. 26, n° 2, p. 2171-2179.
- Heywood, John B, et Thomas Mikus. 1973. « Parameters controlling nitric oxide emissions from gas turbine combustors ». *AGARD Atmospheric Pollution by Aircraft Engines 16 p(SEE N 74-14271 05-20)*.
- Hughes, K. J., T. Turanyi, M.J. Pilling et A.S. Tomlin. 2005. *Sulphur mechanism extension to the Leeds methane oxidation mechanism*. (Version 5.2). En ligne.
< <http://garfield.chem.elte.hu/Combustion/mechanisms/LeedsSOx52.dat> >. Consulté le 24 juin 2013.
- IATA, (International Air Transport Association). 2012. *IATA Annual Review 2012*. Beijing: IATA, 60 p.
- IPCC. 1999. « Aviation and the global atmosphere ». In *Intergovernmental Panel on Climate Change*, sous la dir. de E Penner, J., D.H. Lister, D.J. Griggs, D.J. Dokken et M. McFarland. New York: Cambridge University Press, 373 p.
- IPCC. 2007a. « Climate change 2007: Mitigation of climate change ». In *Contribution of Working Group III to the Fourth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change*, sous la dir. de Metz, B., O.R. Davidson, P.R. Bosch, R. Dave et L.A. Meyer. New York: Cambridge University Press, 863 p.

- IPCC. 2007b. « Climate change 2007: The physical science basis. ». In *Contribution of Working Group I to the Fourth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change*, sous la dir. de Solomon, S., D. Qin, M. Manning, M. Marquis, K. Averyt, M.M.B. Tignor, H.L. Miller et Z. Chen. New York: Cambridge University Press, 1007 p.
- Kärcher, B, et F Yu. 2009. « Role of aircraft soot emissions in contrail formation ». *Geophysical Research Letters*, vol. 36, n° 1.
- Kazakov, Andrei, et Michael Frenklach. 1998. « Dynamic Modeling of Soot Particle Coagulation and Aggregation: Implementation With the Method of Moments and Application to High-Pressure Laminar Premixed Flames ». *Combustion and Flame*, vol. 114, n° 3–4, p. 484-501.
- Kazakov, Andrei, Hai Wang et Michael Frenklach. 1995. « Detailed modeling of soot formation in laminar premixed ethylene flames at a pressure of 10 bar ». *Combustion and Flame*, vol. 100, n° 1–2, p. 111-120.
- Keating, Eugene L. 2007. *Applied combustion*, 2nd ed. Boca Raton, FL: CRC Press, xviii, 657 p. p.
- Kiameh, Philip. 2003. *Power generation handbook: selection, applications, operation, and maintenance*. McGraw-Hill, 506 p.
- Kinsey, John S. 2009. *Characterization of Emissions from Commercial Aircraft Engines during the Aircraft Particle Emissions eXperiment (APEX) 1 to 3*. 600R09130. Washington, DC: Office of Research and Development, U.S. Environmental Protection Agency, 394 p.
- Kirk, D.R. 2012. *MAE 5310 : Combustion Fundamentals*. [Coupled Thermodynamic and Chemical Systems : Well-Stirred Reactor (WSR) Theory]. Melbourne, FL: Florida Institute of Technology, 15 p.
- Lebedev, A. B., A. N. Secundov, A. M. Starik, N. S. Titova et A. M. Schepin. 2009. « Modeling study of gas-turbine combustor emission ». *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 32, n° 2, p. 2941-2947.
- Lee, D. S., G. Pitari, V. Grewe, K. Gierens, J. E. Penner, A. Petzold, M. J. Prather, U. Schumann, A. Bais, T. Berntsen, D. Iachetti, L. L. Lim et R. Sausen. 2010. « Transport impacts on atmosphere and climate: Aviation ». *Atmospheric Environment*, vol. 44, n° 37, p. 4678-4734.
- Lee, David S., David W. Fahey, Piers M. Forster, Peter J. Newton, Ron C. N. Wit, Ling L. Lim, Bethan Owen et Robert Sausen. 2009. « Aviation and global climate change in the 21st century ». *Atmospheric Environment*, vol. 43, n° 22–23, p. 3520-3537.

- Lee, Joosung Joseph. 2005. « Modeling aviation's global emissions, uncertainty analysis, and applications to policy ». Thèse de doctorat. Cambridge, MA, Massachusetts Institute of Technology, 140 p.
- Lefebvre, Arthur H., et Dilip R. Ballal. 2010. *Gas turbine combustion*, 3rd ed. Boca Raton, FL: Taylor & Francis, 557 p.
- Leistner, Kirsten, André Nicolle, David Berthout et Patrick da Costa. 2012. « Kinetic modelling of the oxidation of a wide range of carbon materials ». *Combustion and Flame*, vol. 159, n° 1, p. 64-76.
- Lukachko, S. P., I. A. Waitz, R. C. Miake-Lye, R. C. Brown et M. R. Anderson. 1998. « Production of sulfate aerosol precursors in the turbine and exhaust nozzle of an aircraft engine ». *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, vol. 103, n° D13, p. 16159-16174.
- Lukachko, Stephen P., Ian A. Waitz, Richard C. Miake-Lye et Robert C. Brown. 2008. « Engine Design and Operational Impacts on Particulate Matter Precursor Emissions ». *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power-transactions of The Asme*, vol. 130, n° 2.
- Marr, J. A., L. M. Giovane, J. P. Longwell, J. B. Howard et A. L. Lafleur. 1994. « Soot and Tar Production in a Jet-Stirred/Plug-Flow Reactor System: High and Low C₂H₂ Concentration Environments ». *Combustion Science and Technology*, vol. 101, n° 1-6, p. 301-309.
- Marr, J.A. 1993. « PAH Chemistry in a Jet-Stirred/Plug-Flow Reactor System ». Cambridge, MA, Massachusetts Institute of Technology, 437 p.
- Martini, Bastien. 2008. « Development and assessment of a soot emissions model for aircraft gas turbine engines ». Mémoire de maîtrise. Cambridge, MA, Massachusetts Institute of Technology, 115 p.
- MathWorks. 2012. *MATLAB*.(Version 8.0.0.783). Natick, MA: MathWorks.
- Meeks, Ellen, et Chen-Pang Chou. 2006. « Accurate Predictions of Chemical Phenomena in Chemically Reacting Flows ». In *ECCOMAS CFD 2006: Proceedings of the European Conference on Computational Fluid Dynamics*. (Egmond aan Zee, The Netherlands, September 5-8, 2006). Delft: Delft University of Technology.
- Moniruzzaman, Chowdhury G., et Fangqun Yu. 2012. « A 0D aircraft engine emission model with detailed chemistry and soot microphysics ». *Combustion and Flame*, vol. 159, n° 4, p. 1670-1686.

- Mzé-Ahmed, Amir, Philippe Dagaut, Kamal Hadj-Ali, Guillaume Dayma, Thomas Kick, Julia Herbst, Trupti Kathrotia, Marina Braun-Unkhoff, Jürgen Herzler, Clemens Naumann et Uwe Riedel. 2012. « Oxidation of a Coal-to-Liquid Synthetic Jet Fuel: Experimental and Chemical Kinetic Modeling Study ». *Energy & Fuels*, vol. 26, n° 10, p. 6070-6079.
- Neoh, K. G., J. B. Howard et A. F. Sarofim. 1985. « Effect of oxidation on the physical structure of soot ». *Symposium (International) on Combustion*, vol. 20, n° 1, p. 951-957.
- Odgers, J. 1975. « Current theories of combustion within gas turbine chambers ». *Symposium (International) on Combustion*, vol. 15, n° 1, p. 1321-1338.
- Pompei, Francesco, et John B Heywood. 1972. « The role of mixing in burner-generated carbon monoxide and nitric oxide ». *Combustion and Flame*, vol. 19, n° 3, p. 407-418.
- Pratsinis, Sotiris E. 1988. « Simultaneous nucleation, condensation, and coagulation in aerosol reactors ». *Journal of Colloid and Interface Science*, vol. 124, n° 2, p. 416-427.
- Reaction-Design. 2013a. *CHEMKIN Theory Manual*, July 2013. Coll. « Chemkin Software ». San Diego, CA: Reaction Design, 402 p.
- Reaction-Design. 2013b. *CHEMKIN Tutorials Manual*, July 2013. Coll. « Chemkin Software ». San Diego, CA: Reaction Design, 278 p.
- Reaction-Design. 2013c. *CHEMKIN/CHEMKIN-PRO*.(Version 10131/15131). San Diego, CA: Reaction Design.
- Rezvani, Reza. 2010. « A conceptual methodology for the prediction of engine emissions ». Thèse de doctorat. Atlanta, GA, Georgia Institute of Technology, 309 p.
- Richter, Henning, Silvia Granata, William H. Green et Jack B. Howard. 2005. « Detailed modeling of PAH and soot formation in a laminar premixed benzene/oxygen/argon low-pressure flame ». *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 30, n° 1, p. 1397-1405.
- Rizk, N. K. ; Mongia, H. C. 1993. « Semianalytical Correlations for NO_x, CO, and UHC Emissions ». *ASME J. Eng. Gas Turbines Power*, vol. 115, n° 3, p. 8.
- Rizk, N.K. et al. 2002. « Predictions of NO_x Formation Under Combined Droplet and Partially Premixed Reaction of Diffusion Flame Combustors ». *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, vol. 124, n° 1, p. 31-38.

- Roby, Richard J, Michael S Klassen, Diwakar Vashistat, Richard Joklik et Andre Marshall. 2003. *High fuel-air ratio (FAR) combustor modeling*. Washington, D.C.: DTIC Document, 24 p.
- Rolls-Royce. 1996. *The Jet Engine*, 5th ed. Birmingham: Rolls-Royce, 292 p.
- Roux, Élodie. 2005. « Pour une approche analytique de la dynamique du vol ». Thèse de doctorat. Toulouse, SUPAERO, 214 p.
- Saffaripour, Meghdad, Armin Veshkini, Mohammadreza Kholghy et Murray J. Thomson. 2014. « Experimental investigation and detailed modeling of soot aggregate formation and size distribution in laminar coflow diffusion flames of Jet A-1, a synthetic kerosene, and n-decane ». *Combustion and Flame*, vol. 161, n° 3, p. 848-863.
- Schumann, U, F Arnold, R Busen, J Curtius, B Kärcher, A Kiendler, A Petzold, H Schlager, F Schröder et K-H Wohlfrom. 2002. « Influence of fuel sulfur on the composition of aircraft exhaust plumes: The experiments SULFUR 1–7 ». *Journal of Geophysical Research: Atmospheres (1984–2012)*, vol. 107, n° D15, p. AAC 2-1-AAC 2-27.
- Schumann, U., H. Schlager, F. Arnold, J. Ovarlez, H. Kelder, Ø Hov, G. Hayman, I. S. A. Isaksen, J. Staehelin et P. D. Whitefield. 2000. « Pollution from aircraft emissions in the North Atlantic flight corridor: Overview on the POLINAT projects ». *Journal of Geophysical Research: Atmospheres*, vol. 105, n° D3, p. 3605-3631.
- Seers, Patrice. 2012. *Systèmes de Propulsion : Application et conception - II*. [Notes du cours MEC-775]. Montréal: École de Technologie Supérieure, 57 p.
- Shakariyants, Savad A. 2008. « Generic methods for aero-engine exhaust emission prediction ». Mémoire de maîtrise. Delft, Delft University of Technology, 327 p.
- Starik, Alexander M., Alexander M. Savel'ev, Natalia S. Titova et Ulrich Schumann. 2002. « Modeling of sulfur gases and chemiions in aircraft engines ». *Aerospace Science and Technology*, vol. 6, n° 1, p. 63-81.
- Starik, AM. 2008. « Gaseous and particulate emissions with jet engine exhaust and atmospheric pollution ». *Advances on Propulsion Technology for High-Speed Aircraft*, p. 15-1.
- Sturgess, G. J., R. G. McKinney et S. A. Morford. 1993. « Modification of Combustor Stoichiometry Distribution for Reduced NO_x Emission From Aircraft Engines ». *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power-transactions of The Asme*, vol. 115, n° 3.

- Sturgess, G. J., Joseph Zelina, Dale T. Shouse et W. M. Roquemore. 2005. « Emissions Reduction Technologies for Military Gas Turbine Engines ». *Journal of Propulsion and Power*, vol. 21, n° 2, p. 193-217.
- Swithenbank, J., I. Poll, M. W. Vincent et D. D. Wright. 1973. « Combustion design fundamentals ». *Symposium (International) on Combustion*, vol. 14, n° 1, p. 627-638.
- Timko, Michael T., Timothy B. Onasch, Megan J. Northway, John T. Jayne, Manjula R. Canagaratna, Scott C. Herndon, Ezra C. Wood, Richard C. Miake-Lye et W. Berk Knighton. 2010. « Gas Turbine Engine Emissions—Part II: Chemical Properties of Particulate Matter ». *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power-transactions of The Asme*, vol. 132, n° 6.
- Tremmel, Hans Georg, et Ulrich Schumann. 1999. « Model simulations of fuel sulfur conversion efficiencies in an aircraft engine: Dependence on reaction rate constants and initial species mixing ratios ». *Aerospace Science and Technology*, vol. 3, n° 7, p. 417-430.
- Turns, Stephen R. 2000. *An introduction to combustion : concepts and applications*, 2nd ed. Coll. « McGraw-Hill series in mechanical engineering ». Boston, MA: McGraw-Hill, xxiii, 676 p.
- UC_SanDiego. 2004. *San Diego Mechanism : Nitrogen Chemistry*. (Version 2004-12-09 (2)). En ligne. San Diego, CA
< <http://web.eng.ucsd.edu/mae/groups/combustion/mechanism.html> >. Consulté le 12 décembre 2013.
- Vancassel, Xavier. 2003. « Modélisation microphysique de la formation et de l'évolution d'aérosols et de leurs précurseurs dans les sillages d'avions ». Thèse de doctorat. Strasbourg, Université Louis Pasteur, 279 p.
- Violi, Angela, Andrea D'Anna et Antonio D'Alessio. 1999. « Modeling of particulate formation in combustion and pyrolysis ». *Chemical Engineering Science*, vol. 54, n° 15–16, p. 3433-3442.
- Wang, Hai. 2011. « Formation of nascent soot and other condensed-phase materials in flames ». *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 33, n° 1, p. 41-67.
- Wang, Rui, et Phil Cadman. 1998. « Soot and PAH production from spray combustion of different hydrocarbons behind reflected shock waves ». *Combustion and Flame*, vol. 112, n° 3, p. 359-370.
- Warnatz, J., U. Maas et R.W. Dibble. 2006. *Combustion Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation*, 4th Edition. Berlin: Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 390 p.

- Wen, J. Z., M. J. Thomson, M. F. Lightstone, S. H. Park et S. N. Rogak. 2006. « An improved moving sectional aerosol model of soot formation in a plug flow reactor ». *Combustion Science and Technology*, vol. 178, n° 5, p. 921-951.
- Wen, John Z., M. J. Thomson, S. H. Park, S. N. Rogak et M. F. Lightstone. 2005. « Study of soot growth in a plug flow reactor using a moving sectional model ». *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 30, n° 1, p. 1477-1484.
- Wey, C. C., B. E. Anderson, C. Hudgins, C. Wey, X. Li-Jones, E. Winstead, L. K. Thornhill, P. Lobo, D. Hagen et P. Whitefield. 2006. *Aircraft Particle Emissions eXperiment (APEX)*. NASA/TM-2006-214382. Cleveland, OH: Glenn Research Center (NASA), 531 p.
- Wey, Chowen C., Bruce A. Anderson, Changlie Wey, Richard C. Miake-Lye, Philip Whitefield et Robert Howard. 2007. « Overview on the Aircraft Particle Emissions Experiment (APEX) ». *Journal of Propulsion and Power*, vol. 23, n° 5, p. 898-905.
- Whitefield, Philip D, Prem Lobo, Donald E Hagen, Michael T Timko, Richard C Miake-Lye, Christine Taylor, Gayle Ratliff, Stephen Lukachko, Chris Sequeira et James Hileman. 2008. *Summarizing and interpreting aircraft gaseous and particulate emissions data*. Project 02-04A. Washington, D.C.: Transportation Research Board, 70 p.
- Wilson, Christopher William, Andreas Petzold, Stephan Nyeki, Ulrich Schumann et Reinhard Zellner. 2004. « Measurement and prediction of emissions of aerosols and gaseous precursors from gas turbine engines (PartEmis): an overview ». *Aerospace Science and Technology*, vol. 8, n° 2, p. 131-143.
- Xu, F., A. M. El-Leathy, C. H. Kim et G. M. Faeth. 2003. « Soot surface oxidation in hydrocarbon/air diffusion flames at atmospheric pressure ». *Combustion and Flame*, vol. 132, n° 1-2, p. 43-57.
- Zakharov, V. M., V. E. Kozlov, A. B. Lebedev, A. N. Secundov, S. A. Schepin, A. M. Schepin et K. Ya Yakubovskii. 2009. « Development of reactor models of a diffusion combustion chamber for comparative analysis of detailed and reduced kinetic schemes of combustion of hydrocarbon fuels ». *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, vol. 45, n° 2, p. 126-133.
- Zamuner, B., et F. Dupoirieux. 2000. « Numerical Simulation of Soot Formation in a Turbulent Flame with a Monte-Carlo PDF Approach and Detailed Chemistry ». *Combustion Science and Technology*, vol. 158, n° 1, p. 407-438.
- Zhang, Q., H. Guo, F. Liu, G. J. Smallwood et M. J. Thomson. 2009. « Modeling of soot aggregate formation and size distribution in a laminar ethylene/air coflow diffusion flame with detailed PAH chemistry and an advanced sectional aerosol dynamics model ». *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 32, n° 1, p. 761-768.

Zhang, Qingan. 2009. « Detailed modeling of soot formation/oxidation in laminar coflow diffusion flames ». Thèse de doctorat. Toronto, ON, University of Toronto, 195 p.